

# **Simulationswerkzeuge für die Berechnung hochintensiver Ionenbeschleuniger**

## **Dissertation**

zur Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik  
der Johann Wolfgang Goethe-Universität  
in Frankfurt am Main

von

**Rudolf Tiede**  
aus Bukarest

Frankfurt am Main 2009  
D 30

vom Fachbereich Physik der  
Johann Wolfgang Goethe-Universität als Dissertation angenommen.

Dekan: Prof. Dr. D.-H. Rischke

1. Gutachter: Prof. Dr. U. Ratzinger

2. Gutachter: Prof. Dr. H. Klein

Datum der Disputation: 9. Juli 2009

# Inhaltsverzeichnis

<b>1.</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2.</b>	<b>Strahldynamik in Driftröhren-Linearbeschleunigern</b>	<b>4</b>
2.1.	Beschleunigerstrukturen	4
2.2.	Longitudinale Strahldynamik	9
2.3.	Transversale Strahldynamik	16
2.4.	Strahlparameter im 6-dimensionalen Phasenraum	34
<b>3.</b>	<b>Das KONUS-Strahldynamikkonzept und das Simulationsprogramm LORASR</b>	<b>39</b>
3.1.	„Kombinierte Null Grad Struktur“ KONUS	39
3.2.	Das Teilchensimulationsprogramm LORASR	47
<b>4.</b>	<b>Eine neue Vielteilchenroutine basierend auf einem PIC-FFT Algorithmus</b>	<b>53</b>
4.1.	Definition und Bedeutung der Raumladungskraft für die Teilchendynamik in Driftröhren-Linearbeschleunigern	53
4.2.	Simulationsverfahren zur Berechnung der Raumladungskraft	58
4.3.	Beschreibung des für LORASR entwickelten 3D PIC FFT Algorithmus	84
<b>5.</b>	<b>Validierung des neuen PIC-FFT Poisson-Solvers und Benchmarking innerhalb der HIPPI-Kollaboration</b>	<b>93</b>
5.1.	Die HIPPI-Kollaboration	93
5.2.	Vergleichstests verschiedener Raumladungsroutinen	96
5.3.	Vergleich von Teilchensimulationsrechnungen am Beispiel des GSI UNILAC-Alvarez-Abschnittes	101
<b>6.</b>	<b>Simulation und Analyse von Justage- und Feldfehlern</b>	<b>110</b>
6.1.	Motivation der Simulation von Maschinenfehlern und Klassifizierung der Fehlerarten	110
6.2.	Implementierung von Routinen zur Simulation von Maschinenfehlern in LORASR	113
6.3.	Implementierung neuer Werkzeuge zur Fehleranalyse und Ergebnisdarstellung in LORASR	122
<b>7.</b>	<b>Anwendungsbeispiele</b>	<b>130</b>
7.1.	Anwendungspotential der entwickelten Simulationswerkzeuge	130
7.2.	Überprüfung der Maschinenfehler-Toleranzen am Linearbeschleuniger für die Heidelberger Ionenstrahl-Therapie (HIT)	131
7.3.	Neuer IAP-Vorschlag für einen 125 mA $D^+$ , 5-40 MeV supraleitenden CH-DTL für IFMIF	136
7.4.	Aktuelles Design mit Fehlertoleranzanalyse für den 45 mA, 3-70 MeV Protoneninjektor für GSI-FAIR	139
<b>8.</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>143</b>
<b>9.</b>	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>146</b>



# 1. Einleitung

Bei der weltweiten Entwicklung neuer Beschleunigeranlagen spielt die verfügbare Strahlintensität eine immer wichtigere Rolle.

Protonen- und Ionenbeschleuniger mit hohen Strahlleistungen finden Anwendung als Generatoren von intensiven Sekundärteilchenstrahlen wie zum Beispiel Neutronen (Neutronen-Spallationsquelle), Antiprotonen, Neutrinos oder auch für sekundäre Schwerionenstrahlen seltener Radioisotope.

Die erzeugten Sekundärstrahlen ihrerseits bilden interessante Forschungsobjekte für Fragestellungen aus der Kern- und der Elementarteilchenphysik, für die Transmutation langlebiger radioaktiver Abfälle mit eventueller Energiegewinnung aus Nuklearabfällen sowie für die Erforschung neuer Materialien, um nur ein paar Beispiele zu nennen.

Unter den obengenannten Beispielen stellen Anlagen im Dauerstrichbetrieb mit Primärstrahlströmen von einigen 10 bis zu 100-200 mA und maximalen Strahlleistungen in der Größenordnung 1 – 10 MW die höchsten Anforderungen an die Auslegung von Teilchenbeschleunigern. Solch intensive Primärstrahlen bergen die Gefahr einer Beschädigung oder der Aktivierung von Beschleunigerkomponenten, wenn es zu Strahlverlusten kommt. Daher gehört es zu den wichtigsten Aufgaben bei der strahldynamischen Auslegung moderner Linearbeschleuniger, zum einen die Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung korrekt zu berücksichtigen und zum anderen die Empfindlichkeit der Strahldynamik in Bezug auf Maschinenfehler (Justagefehler, Fehler der Resonatorfeldstärken im Betrieb usw.) zu untersuchen. Letztere wird für die Definition der Fertigungs- und Justagetoleranzen einzelner Linearbeschleunigerkomponenten benötigt.

Aus den obengenannten Fragestellungen resultieren hohe Anforderungen an die verwendeten Strahldynamik-Simulationswerkzeuge:

Um zuverlässige Aussagen in Bezug auf Teilchenverluste machen zu können (bei besonders anspruchsvollen Projekten sind Verlustanteile  $< 10^{-6}$  zu quantifizieren), muss die Anzahl der für die Simulation verwendeten Makroteilchen mindestens  $10^6$  betragen. Dies erfordert neben einer entsprechend hohen Rechenleistung die Entwicklung effizienter Rechenalgorithmen. Insbesondere die Berechnung der Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung („Raumladungskraft“) ist wegen der quadratischen Abhängigkeit von der verwendeten Teilchenzahl im Falle der Berechnung mittels „klassischer“, direkter Coulomb-Wechselwirkung sehr zeitaufwendig.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde eine neue Routine zur Berechnung der Raumladungskräfte des Teilchenstrahls entwickelt. Diese basiert auf einem „Schnelle Fourier-Transformation – Algorithmus“ (englisch: fast Fourier transform, FFT). Die Schnelle Fourier-Transformation ist ein rekursiver Algorithmus zur näherungsweisen Berechnung der Koeffizienten der Diskreten Fourier-Transformation (DFT). Durch rekursives Aufteilen einer DFT der Länge  $N = 2 \cdot n$  auf zwei Transformationen der Länge  $n = N/2$  wird die Anzahl der Rechenoperationen von der Ordnung  $N^2$  auf die Ordnung  $N \cdot \log_2 N$  reduziert. Dies hat dramatische Konsequenzen in Bezug auf die Recheneffizienz. So ist bei einer Ordnung  $N^2$  (klassischer Algorithmus) für Simulationen mit 4500 Teilchen ein vergleichbarer Rechenaufwand notwendig wie für Simulationen mit  $10^6$  Teilchen unter Verwendung des FFT-Algorithmus.

Eine Beschreibung des implementierten Algorithmus im Vergleich mit alternativen Methoden der Raumladungsberechnung sowie ein Vergleich der theoretischen mit der tatsächlich erzielten Recheneffizienz sind Gegenstand des Kapitels 4 der vorliegenden Arbeit.

Die neue Raumladungsroutine konnte erfolgreich im Rahmen der von der EU geförderten „HIPPI“-Kollaboration getestet und validiert werden („HIPPI“ = High Intensity Pulsed Proton Injectors). Ergebnisse aus Vergleichsrechnungen mit anderen einschlägigen Teilchensimulationsprogrammen wurden in der Referenz [1] publiziert und werden ausführlich im Kapitel 5 diskutiert.

Des Weiteren wurden Simulationswerkzeuge zum Aufprägen von Maschinenfehlern in Strahldynamikrechnungen sowie Methoden zur Analyse und Quantifizierung der Auswirkungen der angenommenen Fehler auf die Strahldynamik (z.B. die Ermittlung von Strahlverlustprofilen entlang des Beschleunigers) entwickelt. Diese werden in den Kapiteln 6 und 7 der vorliegenden Arbeit behandelt.

Einige Beispiele von möglichen Maschinenfehlern sind die Fehljustage von Quadrupollinsen oder von Driftröhren, Fabrikationsfehler (Abweichungen bei den geometrischen Längen), Abweichungen von der gewünschten elektrischen Feldverteilung in den Beschleunigungsspalten, Schwankungen in der HF-Versorgung während des Betriebes mit entsprechender Variation der Spaltsspannungsamplituden und -phasen, usw.

Alle erwähnten Fehlerquellen tragen zur Verschlechterung der Strahleigenschaften bis hin zu Strahlverlusten bei. Deshalb gehört es mittlerweile zur „Standardausstattung“ moderner Teilchendynamik-Simulationsprogramme, entsprechende Werkzeuge zum Aufprägen von Maschinenfehlern sowie zur Fehleranalyse bereitzustellen.

Ein wesentliches Ergebnis von Maschinenfehler-Untersuchungen ist neben der Definition von Toleranzgrenzen bei der Herstellung einzelner Beschleunigerkomponenten die Ermittlung der notwendigen Genauigkeit der HF-Abstimmung der Beschleunigerresonatoren, sowie der geforderten Stabilitätskriterien für die HF-Versorgung.

Somit kommt dieser Art von Simulationswerkzeugen eine große Bedeutung für die Praxis zu.

Alle im Rahmen der Dissertation entwickelten Algorithmen und Werkzeuge sind universell einsetzbar. Jedoch war für die praktische Anwendung die Integration in ein bestehendes Strahldynamik-Simulationsprogramm notwendig. Dabei wurde das Teilchensimulationsprogramm LORASR entsprechend weiterentwickelt.

„LORASR“ (Abkürzung bedeutet „Longitudinale und radiale Strahldynamikrechnungen mit Raumladung“) wurde ursprünglich für die strahldynamische Auslegung des Münchener Schwerionennachbeschleunigers entwickelt [2]. Wichtige Programmverbesserungen und Ergänzungen fanden in den 90’er Jahren bei der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt statt, und zwar im Zuge der Entwicklung der dortigen Injektor-Linearbeschleuniger, namentlich des Hochladungsinjektors (HLI) [3] und des Hochstrominjektors (HSI) [4], sowie für das Design des CERN-Bleininjektors [5].

In den vergangenen Jahren wurde die Programmentwicklung am Institut für Angewandte Physik (nachfolgend mit „IAP“ abgekürzt) der J.W. Goethe-Universität Frankfurt fortgesetzt. Aktuelle Designs, die in Frankfurt mit LORASR durchgeführt wurden bzw. werden, sind der Heidelberger Therapieinjektor [6], der HITRAP-Abbremser [7] und der Protonen-Linac bei der GSI [8], sowie Frankfurter Alternativvorschläge zum IFMIF - („International Fusion Materials Irradiation Facility“) [9,10,11] und zum PDS-XADS / EUROTRANS [11] – Linearbeschleuniger. Der Heidelberger Therapieinjektor befindet sich zurzeit in der Inbetriebnahme- und der HITRAP-Abbremser in der Aufbauphase.

Ein gemeinsames Merkmal aller obengenannten Beispiele von realisierten bzw. geplanten Linearbeschleunigern ist die Verwendung von H-Mode Kavitäten sowie die Anwendung des „Kombinierte Null Grad Struktur (KONUS)“ Strahldynamik-Konzepts [12]. Eine KONUS – Periode besteht aus einer Quadrupol-Triplettlinse, einer Rebuncher-Sektion aus wenigen Beschleunigerspalten (Gaps) mit negativer Sollphase, sowie aus einer aus vielen Gaps bei 0°

Sollphase bestehenden Hauptbeschleunigungssektion. Auf diese Weise werden die Hauptaufgaben in einem Beschleuniger (radiale und longitudinale Strahlfokussierung sowie Beschleunigung) räumlich voneinander getrennt. Dadurch wird eine besonders effiziente Teilchenbeschleunigung, mit hohen gemittelten Beschleunigungsgradienten realisiert. Dieses Konzept ist besonders effektiv, wenn man  $\beta\lambda/2$  H-Mode-Kavitäten – „Interdigital H-Typ (IH)“ oder „Crossbar H-Typ (CH)“ – verwendet [12]. Diese bestehen in der Regel aus vielen dünnwandigen Driftröhrchen, welche – anders als beim konventionellen Alvarez-Driftröhrenbeschleuniger – keine Quadrupollinsen beherbergen. Durch die kompakte Bauweise und die Wahl möglichst kleiner Driftröhreninnen- und Außendurchmesser wird eine hohe Shuntimpedanz (Verhältnis vom Quadrat der Beschleunigungsspannung zur verbrauchten HF-Leistung) erreicht.

Nach einer allgemeinen Einführung in die Grundlagen der Strahldynamik in Linearbeschleunigern (Kapitel 2) wird in Kapitel 3 der vorliegenden Arbeit auf die Besonderheiten der KONUS-Strahldynamik eingegangen und das LORASR-Strahldynamikprogramm ausführlich vorgestellt.

Das Design von normal- und supraleitenden H-Mode-Kavitäten bildet seit mehreren Jahren einen Forschungsschwerpunkt am IAP. Dabei wurde die KONUS-Strahldynamik Hand in Hand mit der H-Mode-Strukturentwicklung vorangetrieben und den jeweiligen Anforderungen aus den aktuellen Projekten angepasst. Das Teilchendynamikprogramm LORASR wurde dabei ebenfalls laufend verbessert.

Somit kommen die in der vorliegenden Arbeit erzielten Fortschritte nicht nur dem Programm LORASR zugute, sondern allgemein der Entwicklung von H-Mode-Linacs am IAP. LORASR ist dabei das weltweit einzige Strahldynamikprogramm, welches dediziert für die Untersuchung von KONUS-Kanälen entwickelt wurde. Es stand demzufolge kein gängiges Strahldynamikprogramm aus der Beschleunigergemeinschaft als Alternative zur Verfügung, da es sich, wie bereits erwähnt, um eine hochspezialisierte Anwendung handelt.

Im 7. Kapitel der vorliegenden Arbeit wird auf aktuelle Anwendungsbeispiele Bezug genommen. Dies ist zum einen der Heidelberger Therapiebeschleuniger [6], und zum anderen aktuelle Hochstromdesigns wie der 70 mA, 3-70 MeV Protoneninjektor für GSI-FAIR [8] sowie der IAP-Vorschlag für einen 125 mA  $D^+$ , 5-40 MeV supraleitenden CH-DTL für IFMIF [9,11].

Die Fragestellungen sind dabei etwas unterschiedlich: Beim Therapiebeschleuniger liegen Daten aus der Aufbau- und Inbetriebnahmephase bereits vor, sodass diese für Vergleichssimulationen herangezogen werden können, um optimale Strahlanpassungen sowohl für das laufende als auch für künftige Projekte dieser Art zu gewährleisten.

Für die beiden Hochstrommaschinen (GSI-FAIR und IFMIF) wurde ein adäquates strahldynamisches Design (mit bis zu  $10^6$  Simulationsteilchen mit genauer Quantifizierung der Verluste) erst durch die im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelten Algorithmen möglich. Somit liegt die überwiegende Zielsetzung in diesen Fällen darin, die neuen Algorithmen an konkreten Anwendungsbeispielen zu verifizieren. Detailliert ausgearbeitete strahldynamische Designs sind hingegen nicht Gegenstand der vorliegenden Arbeit. Vielmehr gibt es mehrere abgeschlossene und laufende Doktorarbeiten am IAP, welche mit Hilfe des LORASR-Codes Linearbeschleunigerauslegungen für unterschiedliche Anwendungen entwickeln und dabei wesentlich auf die neuen Programm-Routinen zurückgreifen.

## 2. Strahldynamik in Driftröhren-Linearbeschleunigern

### 2.1. Beschleunigerstrukturen

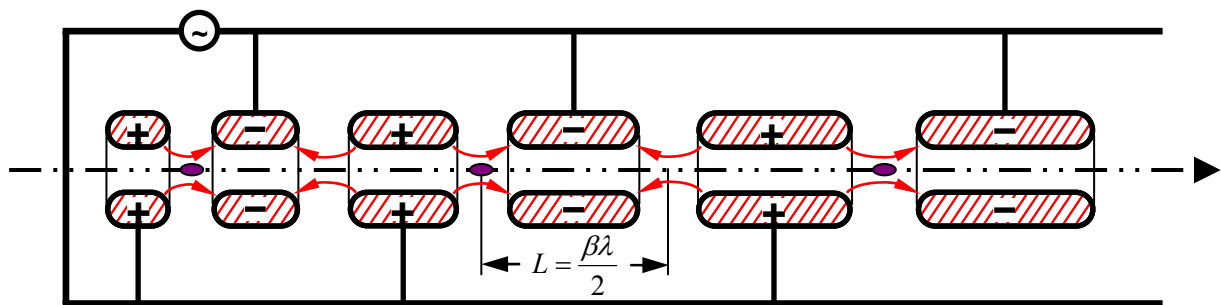
Historisch betrachtet wurden zuerst Gleichspannungs-Linearbeschleuniger entwickelt. Die bekanntesten Vertreter sind der Van de Graaff-Beschleuniger und der Cockroft/Walton Kaskaden-Beschleuniger.

Beim Linearbeschleuniger nach van de Graaff wird die Hochspannung zwischen der Quelle und den Beschleunigungselektroden durch mechanischen Ladungstransport (mittels eines umlaufenden Bandes) aufgebaut. Der Cockroft/Walton Beschleuniger besteht aus einer kaskadierten Anordnung von Dioden und Kondensatoren. Dabei wird die Ladung schrittweise durch die Gleichrichterstufen transportiert und von der Kondensatorbank zum Aufbau der benötigten Hochspannung gespeichert.

Der Nachteil dieser elektrostatischen Anlagen liegt darin, dass die Beschleunigungsspannung  $V$  permanent entlang der gesamten Beschleunigungsstrecke anliegen muss, also mindestens für die Dauer des Teilchendurchgangs durch den Beschleuniger. Darüber hinaus ist die erreichbare Endenergie  $q \cdot V$  der beschleunigten Teilchen durch auftretende Spannungsüberschläge begrenzt. Die erzielbare Hochspannung beträgt typischerweise 1 - 10 MV (unter Verwendung von Isoliergas) im van de Graaff Beschleuniger und 1 - 4 MV im Kaskaden-Beschleuniger.

Bereits 1924 wurde deshalb von G. Ising vorgeschlagen, die elektrische Wellenfront einer Funkenentladung synchron mit den beschleunigten Teilchen durch eine Reihe metallischer Driftröhren zu schicken. Dabei sollte zum Zeitpunkt des Durchgangs der Teilchen durch die Spalte ein beschleunigendes elektrisches Feld zwischen benachbarten Driftröhren aufgebaut werden.

Da sich die Synchronisation der Hochspannungspulse mit dem Teilchenstrahl als schwierig erwies, kam 1928 von Wideröe [ 13 ] der Vorschlag, diese durch eine Hochfrequenzschwingung zu ersetzen. In Abbildung 1 wird dieses Konzept schematisch dargestellt:



**Abbildung 1** Schematischer Aufbau eines Hochfrequenz-Linearbeschleunigers nach Wideröe (1928).

Die beschleunigten Teilchen durchlaufen eine periodische Anordnung von zylindrischen Elektroden („Driftröhren“), welche mit den Enden einer Hochfrequenz-Doppelleitung verbunden sind. Aufeinander folgende Driftröhren werden daher entgegengesetzt aufgeladen. Das elektrische Feld in den Spalten („Gaps“) zwischen den Driftröhren zeigt abwechselnd in bzw. gegen die Flugrichtung der Teilchen und kann bei richtiger Polung (also maximal in jedem 2. Spalt) zur Teilchenbeschleunigung genutzt werden. Während sich die Teilchenpulse im (annähernd feldfreien) Inneren der Driftröhren befinden, kann das elektrische Feld umgepolt werden, so dass im nächsten Gap erneut ein beschleunigendes Feld auf das Teilchen wirkt.



Dabei muss gewährleistet sein, dass das zeitlich veränderliche elektrische Feld

$$E_z(t) = E_0 \cdot \cos(\omega t - k_z z) \quad (2.1)$$

die gleiche Phasengeschwindigkeit

$$v_{ph} = \omega / k_z \quad (2.2)$$

besitzt wie die momentane Geschwindigkeit  $v_T$  der beschleunigten Teilchen. Somit erhält man aus Gleichung (2.1) folgende Bedingung für 2 aufeinander folgende Spaltmitten:

$$\omega t - k_z z = 0 \quad (2.3)$$

Der Abstand zwischen zwei Spaltmitten wird „Periodenlänge“  $L$  genannt. Wie man aus Abbildung 1 erkennt, ändert sich bei der von Wideröe vorgeschlagenen Beschleunigerstruktur die Richtung des elektrischen Feldes in zwei aufeinander folgende Spalten um  $180^\circ (\pi)$ , was einer halben HF-Schwingungsperiode entspricht. Somit lässt sich die Bedingung aus Gleichung (2.3) wie folgt umformen:

$$k_z L = \pi \Rightarrow L = \frac{\pi}{k_z} = \frac{\pi}{\omega} \cdot v_T = \frac{\pi \cdot \beta \cdot c}{2\pi \cdot f} = \frac{\beta \cdot \lambda}{2} \quad (2.4)$$

Man spricht daher von einer  $\beta\lambda/2$  Struktur. Nach Gleichung (2.4) muss also für eine synchrone Bewegung der Teilchen mit der HF-Welle mit wachsender Teilchengeschwindigkeit auch der Spaltmittenabstand  $L$  immer größer werden.

Das von Wideröe vorgeschlagene Konzept eignet sich besonders zur Beschleunigung schwererer Teilchen bei niedrigen Energien. Leichtere Teilchen wie Protonen und insbes. Elektronen erreichen bereits nach kurzen Beschleunigungsstrecken hohe Geschwindigkeiten (für Elektronen ist  $\beta$  nahe bei 1 schon nach wenigen Metern). In diesem Falle müssten entweder die Driftröhren unpraktisch lang (mit damit verbundener sehr schlechter Beschleunigungseffizienz) oder die Frequenz entsprechend erhöht werden (bis zu 1 GHz). Im letzteren Fall wären die HF-Verluste durch Abstrahlung bei dieser Art von Struktur zu hoch.

Eine bessere Effizienz in Bezug auf die benötigte HF-Leistung wird bei der von Alvarez vorgeschlagenen Struktur [14] dadurch erreicht, dass alle Driftröhren in einen gemeinsamen leitenden Tank integriert werden und das System als Ganzes in einem Schwingungsmodus erregt wird, welcher dem  $TM_{010}$ - ( $E_{010}$ ) Mode eines leeren zylindrischen Resonators entspricht. Dabei tragen die Resonator-Enddeckel entgegengesetzte Ladungen und das resultierende axiale elektrische Feld wird durch Einbringung der Driftröhren lokal erhöht. Anders als bei der Wideröe-Struktur befinden sich nun die beiden Enden einer jeden Driftröhre auf entgegengesetztem Potential. Während einer HF-Schwingung fließen die Ladungen also nur zwischen den Driftröhrenenden und nicht über die Resonatorwand.

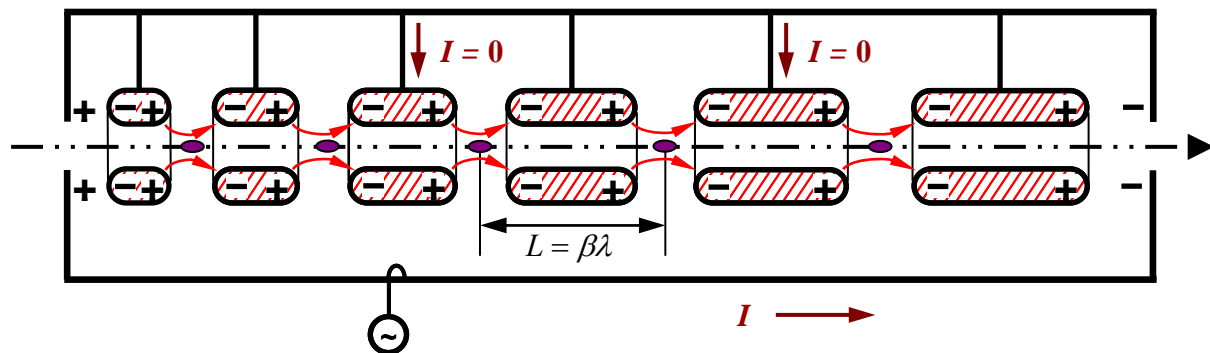


Abbildung 2 Schematischer Aufbau einer Alvarez-Struktur (1945).

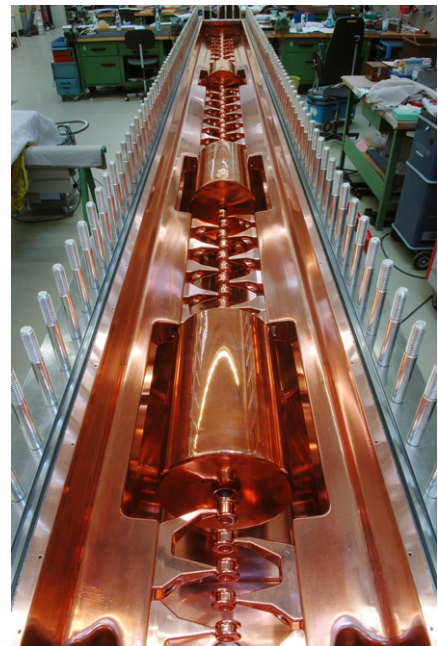
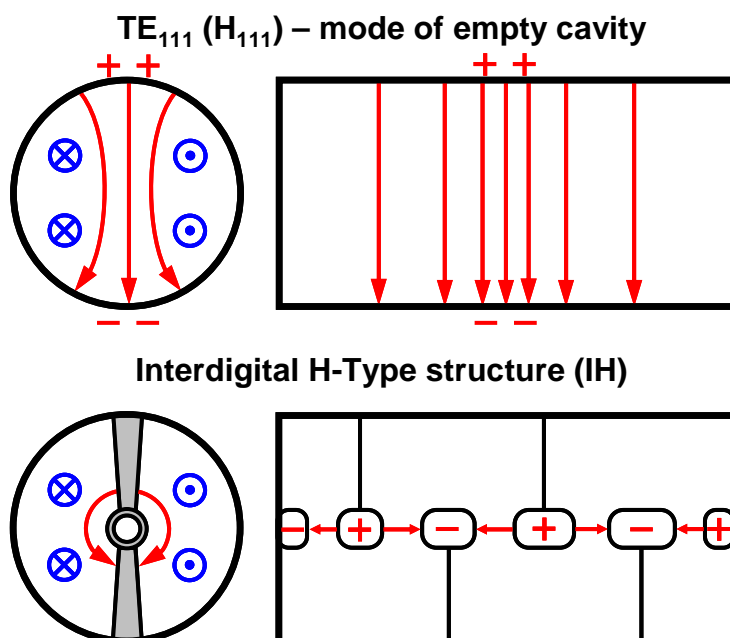
Bereits in den 50'er Jahren des vergangenen Jahrhunderts gab es erste Vorschläge von Beschleunigerstrukturen basierend auf H-Moden des leeren zylindrischen Resonators. Diese haben den Vorteil, dass bei Ausrichtung des Magnetfeldes parallel zur Strahlachse die Wandströme hauptsächlich transversal entlang des zylindrischen Mantels verlaufen. Dadurch haben die Wandströme im Vergleich zur Alvarez-Struktur (dort werden die Enddeckel aufgeladen) kürzere Pfadlängen, was die HF-Verluste drastisch reduziert.

Die niedrigste für den Aufbau einer Beschleunigerkavität verwendbare H-Mode ist die  $H_{111}$ -Mode (Abbildung 3). Leider sind im leeren Resonator die elektrischen Feldlinien ebenfalls transversal ausgerichtet und können deshalb nicht zur Teilchenbeschleunigung in Strahlrichtung verwendet werden. Zudem nimmt die Feldstärke sowohl für die  $H_z(z)$ - als auch für die  $E_r(z)$ - und  $E_\phi(z)$ -Komponenten mit  $\sin(\frac{\pi}{L_{\text{tank}}}z)$  zu den Tankenden hin ab.

Durch den Einbau von Driftröhren samt metallischen Haltern wird jedoch das ursprünglich transversale E-Feld im Bereich der Gaps in longitudinaler Richtung umgelenkt und kann zur Teilchenbeschleunigung genutzt werden. Eine verbleibende transversale Komponente kann durch entsprechende Anpassung der Driftröhrengometrie eliminiert werden.

Außerdem kann durch gezielte Variation des kapazitiven ( $C'$ ) sowie des induktiven ( $L'$ ) Belages entlang der Struktur der sinusförmige Abfall der Feldstärken zu den Resonatorenenden hin verhindert werden, d.h. die Spaltspannungen sind dann annähernd konstant und das Magnetfeld umschließt den gesamten Resonator in longitudinaler Richtung. Man bezeichnet dann die für den Betrieb der Kavität verwendete Grundmode als  $H_{110}$ -Mode, da die Stehwellen nun keine Knoten mehr an den Enddeckeln besitzen.

Die Beschleunigerstruktur selbst trägt den Namen „**Interdigitale H-Struktur**“ (IH). Die Bezeichnung rührt daher, dass sich die Driftröhren jeweils abwechselnd auf unterschiedlichem Potential befinden, meist an gegenüberliegenden Rippen („Girder“) befestigt, und wie Finger ineinander greifen (lat. digitus = Finger). Ansonsten funktioniert die Teilchenbeschleunigung nach dem bereits vorgestellten Wideröe-Prinzip,



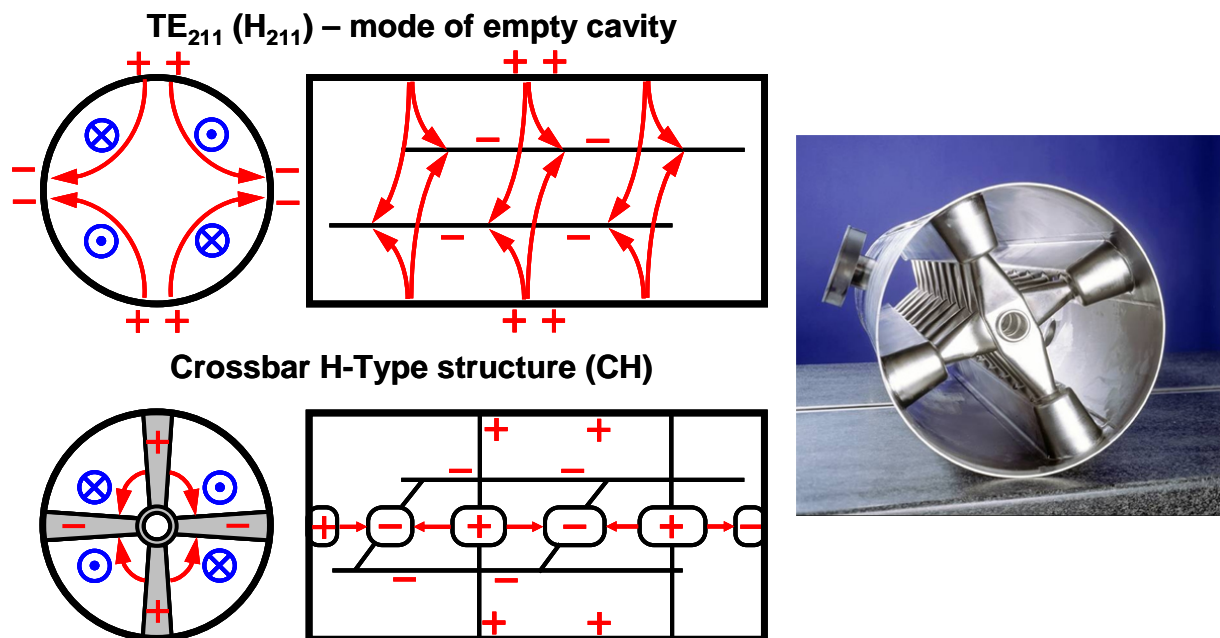
**Abbildung 3** Schematischer Aufbau einer Interdigitalen H-Mode Struktur (IH), im Vergleich mit dem Feldlinienbild der  $TE_{111}$ -Mode eines leeren zylindrischen Resonators, sowie ein Beispiel für eine realisierte Beschleunigerkavität (IH-DTL für den Heidelberger Therapie-Beschleuniger [6], 216.8 MHz, 0.4 – 7.0 MeV/u).

d.h. H-Mode Kavitäten sind  $\beta\lambda/2$ -Strukturen.

Durch den Einbau der Driftröhren mitsamt Halterungen („Stems“) und eventuell Rippen wird die Gesamtkapazität von H-Mode Kavitäten wesentlich gegenüber dem leeren zylindrischen Resonator erhöht. Die effektive Kapazität konzentriert sich dabei auf die Driftröhren, so dass in einem Großteil des Tankquerschnitts ein homogenes Magnetfeld herrscht, was eine gleichmäßige Verteilung der HF-Verluste ermöglicht. Typischerweise wird nach Einbau der Driftröhrenstruktur eine effektive Kapazitätserhöhung um den Faktor 4-10 erreicht, was zu einer Absenkung der Resonanzfrequenz um den Faktor 2-3 gegenüber dem leeren Resonator führt. Im Vergleich dazu findet bei der Alvarez-Struktur eine Frequenzabsenkung von nur etwa 10% statt, da die Driftröhren nur an dünnen Stems befestigt sind und somit alleine zu einer geringen Störung des  $E_{010}$  Hohlleiter-Modes beitragen. Aus diesem Grunde haben IH-Kavitäten kompaktere Außenmaße bei gegebener Resonanzfrequenz, was die Bauweise sehr begünstigt, insbesondere bei tiefen Resonanzfrequenzen (20 – 200 MHz), d.h. für den niederenergetischen Anwendungsbereich ( $\beta = 0.01 - 0.1$ ).

Für den mittlereenergetischen Anwendungsbereich ( $\beta = 0.1 - 0.5$ ,  $f = 300 - 600$  MHz) wirken sich die besonderen Eigenschaften der IH-Struktur zunehmend nachteilig aus: Kompakte Tankdurchmesser verhindern eine homogene Magnetfeldverteilung im Querschnitt, außerdem tragen die Driftröhren nicht mehr den überwiegenden Anteil der effektiven Kapazität.

Um das Verhältnis von Driftröhren- zu Tankdurchmesser günstiger zu gestalten, wurde die Verwendung der nächsthöheren Grundmode vorgeschlagen, nämlich der  $H_{211}$ -Mode. Die entsprechende Resonatorstruktur wird als „**Cross Bar H-Struktur**“ (CH) bezeichnet. Abbildung 4 zeigt die Feldlinienbilder im leeren Resonator sowie in der CH-Struktur schematisch. Die Driftröhren werden nun mit je zwei Halterungen („Stems“) entweder direkt oder über Rippen („Girder“) mit dem Tankmantel verbunden. Es befinden sich nun je zwei gegenüberliegenden Rippen auf gleichem Potential.



**Abbildung 4** Schematischer Aufbau einer Crossbar H-Mode Struktur (CH), im Vergleich mit dem Feldlinienbild der  $TE_{211}$ -Mode eines leeren zylindrischen Resonators, sowie ein Beispiel für eine realisierte Beschleunigerkavität (Supraleitende CH-DTL Prototypkavität [15], 360 MHz,  $\beta = 0.1$ ).

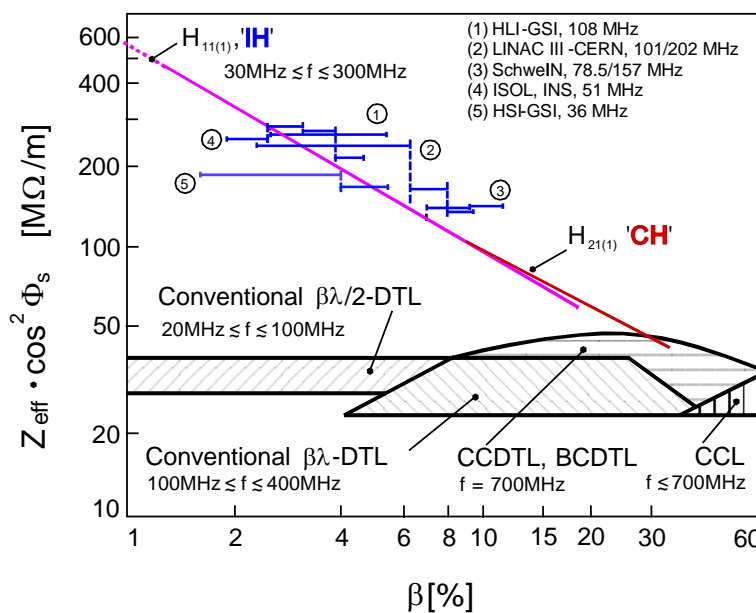
Trotz der dargelegten Vorteile von H-Mode Kavitäten für eine effektive Beschleunigung leichter und schwerer Ionen bei niedrigen und mittleren Energien, haben sich diese bis heute nur bedingt als Alternative zum Alvarez-DTL durchgesetzt, da in vielen Labors die Expertise bezüglich Tankdimensionierung, Einstellung der gewünschten Spaltspannungsverteilung usw. fehlt. Während man früher (und z.T. noch heute) bei neuen Designs auf die Skalierung anhand bestehender Strukturen sowie auf HF-Modell- und Prototyp-Kavitäten setzen musste, sind heutzutage numerische Simulationstools wie CST Microwave Studio® [16] für das mechanische und das HF-Design der Kavitäten zwingend erforderlich geworden.

Bereits bei der Realisierung der ersten zwei gekoppelten IH-Strukturen in den 70'er und 80'er Jahren an der TU München musste darauf geachtet werden, dass eine stabile Teilchenbewegung im 6-dimensionalen Phasenraum durch den gesamten Beschleuniger gewährleistet wurde. So wurde zeitgleich mit der Entwicklung mechanischer Konstruktionskonzepte auch ein besonderes Strahldynamik-Konzept ausgearbeitet, die sogenannte „Kombinierte Null Grad Struktur“ (KONUS). Dieses Konzept, welches in Kapitel 3 der vorliegenden Arbeit erläutert wird, ermöglicht es, die transversale Fokussierung der Teilchen räumlich von der Beschleunigung zu trennen. Die Fokussierung erfolgt durch magnetische Quadrupol-Triplett-Linsen, welche sich in der Regel außerhalb des Resonators, zwischen zwei H-Mode Kavitäten befinden, bei niedrigen Energien aber auch ins Tankinnere integriert werden können, wie aus Abbildung 3 ersichtlich. Dagegen wird bei der konventionellen für Alvarez-Strukturen verwendeten „FODO“ Strahldynamik (vgl. Kapitel 2.3.2) in der Regel je eine magnetische Quadrupol-Singulett-Linse pro Driftröhre benötigt.

Da bei H-Mode Kavitäten unter Verwendung der KONUS-Strahldynamik keine Fokussierungselemente in die Driftröhren integriert werden müssen, können diese sehr kompakt (insbes. dünnwandig, siehe Abbildung 3) gebaut werden, was die Kapazität reduziert und somit zu der sehr hohen Beschleunigungseffizienz („Shuntimpedanz“  $Z_{eff}$ ) von H-Mode-Kavitäten beiträgt.

Diese ist als Verhältnis vom Quadrat der erzielten Beschleunigungsspannung zur HF-Verlustleistung wie folgt definiert:

$$Z_{eff} \cdot \cos^2 \varphi_s = \frac{V_{gain}^2}{P_{loss} \cdot L_{tank}} \quad (2.5)$$



**Abbildung 5** Vergleich der Effizienz zwischen „konventionellen“ und H-Mode Strukturen (Quelle: [17]).

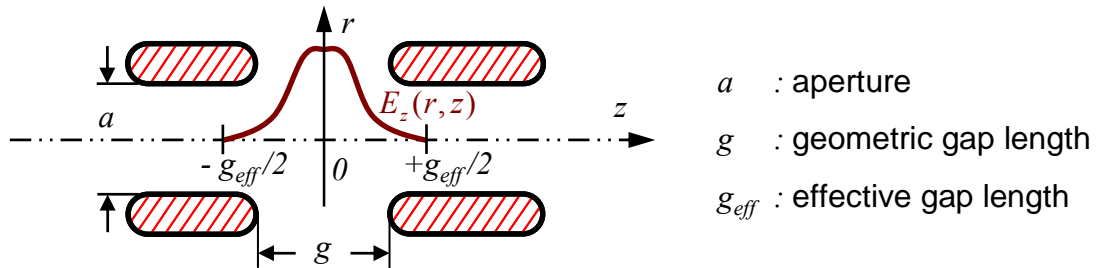
## 2.2. Longitudinale Strahldynamik

### 2.2.1. Energiegewinn beim Durchgang durch einen Beschleunigungsspalt

Um Stabilitätskriterien für die longitudinale Strahldynamik in einem Ionen-Linearbeschleuniger zu definieren, muss zunächst die Wirkung der beschleunigenden Feldkomponente  $E_z(r,z)$  beim Durchgang der Teilchen durch einen Beschleunigungsspalt näher beschrieben werden.

Abbildung 6 zeigt schematisch einen möglichen Verlauf von  $E_z(r,z)$  auf der Achse. Der genaue Feldverlauf hängt von der Geometrie der Driftröhren ab und kann entweder näherungsweise analytisch oder mittels numerischer Simulationen berechnet werden. Das Feld kann meist als symmetrisch bezüglich der Spaltmitte ( $z = 0$ ) angenommen werden.

Die Feldlinien reichen teilweise bis in den (sonst feldfreien) Innenraum der Driftröhren hinein, so dass man zur Integration der Feldstärke das gesamte Intervall  $[-g_{eff}/2, +g_{eff}/2]$  berücksichtigen muss, in welchem das Feld auf 0 abfällt.



**Abbildung 6** Schematischer Verlauf der axialen elektrischen Feldstärke  $E_z(r,z)$  in einem Beschleunigungsspalt.

Außerdem ändert sich der Betrag des elektrischen Feldes beim Teilchendurchgang durch den Spalt permanent aufgrund der HF-Schwingung gemäß Gleichung (2.1), und zwar:

$$E_z(r=0, z, t) = E_z(0, z) \cdot \cos(\omega t + \varphi) \quad (2.6)$$

Die Phase  $\varphi$  stellt die Beziehung zwischen der HF-Schwingung und der Teilchenposition im Spalt her. Ist  $\varphi = 0$ , so befindet sich das Teilchen genau dann in der Spaltmitte, wenn das beschleunigende Feld das Maximum erreicht. In Bezug auf die Nomenklatur aus Abbildung 6 bedeutet dies, dass sich das Teilchen zum Zeitpunkt  $t = 0$  am Ort  $z = 0$  befindet. Somit lässt sich der Energiegewinn des Teilchens nach durchlaufener Strecke  $g_{eff}$  wie folgt berechnen:

$$\Delta W = q \cdot \int_{-g_{eff}/2}^{+g_{eff}/2} E_z(0, z) \cdot \cos(\omega t + \varphi) \cdot dz \quad (2.7)$$

Die dazugehörige Spaltspannung lässt sich wie folgt bestimmen:

$$U_0 = \int_{-g_{eff}/2}^{+g_{eff}/2} E_z(0, z) \cdot dz$$

$U_0$  ist die Spannung, welche ein fiktives Teilchen beim Spaltdurchgang mit „unendlich großer“ Geschwindigkeit erfahren würde. Demgegenüber kann ein reales Teilchen mit der Geschwindigkeit  $v$  maximal die „effektive“ Spaltspannung  $U_{eff}$  erfahren:

$$U_{eff} = \int_{-g_{eff}/2}^{+g_{eff}/2} E_z(0, z) \cdot \cos(\omega t) \cdot dz$$

Das Verhältnis der beiden Größen wird als Transit-Time-Faktor bezeichnet:

$$T = \frac{\left| \int_{-g_{eff}/2}^{+g_{eff}/2} E_z(0, z) \cdot \cos(\omega t) \cdot dz \right|}{\int_{-g_{eff}/2}^{+g_{eff}/2} |E_z(0, z)| \cdot dz} = \frac{U_{eff}}{U_0} \leq 1 \quad (2.8)$$

Der Transit-Time-Faktor gibt also den Anteil des Energiegewinns des Teilchens in einem HF-Feld verglichen mit dem möglichen Energiegewinn in einem zeitlich unveränderlichen Feld an. Dieser kann theoretisch den Wert 1 erreichen, liegt aber in der Praxis typischerweise zwischen 0.8 – 0.9. Der genaue Wert hängt von der Spaltgeometrie und vom Verhältnis Spalllänge / Periodenlänge ab. „Kurze“ Spalte haben einen hohen Transit-Time-Faktor.

Ferner kann ein mittleres Feld  $E_0$  wie folgt definiert werden:

$$E_0 = \frac{1}{g_{eff}} \int_{-g_{eff}/2}^{+g_{eff}/2} E_z(0, z) \cdot dz$$

Mit dieser Definition sowie mit Gleichung (2.8) lässt sich der Energiegewinn in einem Beschleunigungsspalt gemäß Gleichung (2.7) in einer kompakteren Form ausdrücken:

$$\Delta W = q \cdot E_0 \cdot T \cdot g_{eff} \cdot \cos(\varphi) = q \cdot U_{eff} \cdot \cos(\varphi) \quad (2.9)$$

### 2.2.2. Phasenstabilität der longitudinalen Teilchenbewegung

Das grundlegende Prinzip für eine stabile Teilchenbewegung in Strahlrichtung (longitudinal) wurde erstmals 1945 von E.M. McMillan [18] für Kreisbeschleuniger formuliert und von L. Alvarez [14] erstmals auf Linearbeschleuniger angewandt.

Wie im Kapitel 2.1 erläutert, müssen die beschleunigten Teilchen aufeinanderfolgende Spaltmitten jeweils synchron zur Phase der HF-Welle erreichen (Gleichung (2.1)). Es wird daher angenommen, dass es ein „synchrones“ Referenzteilchen gibt, welches den gesamten Beschleuniger optimal durchläuft. Dieses Teilchen wird fortan „Sollteilchen“ genannt und alle dazugehörigen Parameter mit dem Index „s“ markiert.

Das Sollteilchen muss also am Eingang des Beschleunigers die passende Energie  $W_s$  besitzen und die erste Spaltmitte mit der in Bezug auf die HF-Welle passenden Phase  $\varphi_s$  erreichen, um die korrekte Größe des beschleunigenden Feldes zu erfahren:

$$U_{eff,s} = U_0 \cdot \cos(\varphi_s) = E_0 \cdot T \cdot g_{eff} \cdot \cos(\varphi_s) \quad (2.10)$$

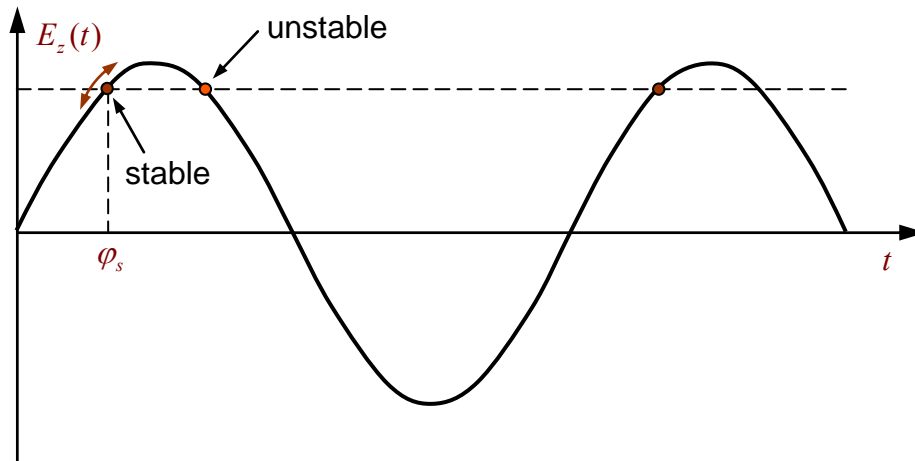
Diese Bedingung muss ebenso für alle weiteren Spaltdurchgänge entlang des Beschleunigers gelten.

Die maximale Beschleunigung wird für  $\varphi_s = 0$  erreicht (zum Vergleich Gleichung (2.6) sowie Erläuterungen aus dem vorherigen Kapitel). Jedoch besitzt jeder reelle Strahl eine gewisse räumliche und energetische Verteilung, so dass es bei der Wahl von  $\varphi_s = 0$  immer Teilchen gibt, welche die Spaltmitte zu einem früheren oder späteren Zeitpunkt als das Sollteilchen erreichen und somit einen zu geringen Energiegewinn erhalten. Die Bewegung des gesamten Strahls („Bunches“) wäre nach mehreren Perioden im Linearbeschleuniger nicht mehr stabil.

Deshalb wählt man im Allgemeinen  $\varphi_s \neq 0$ , wobei es dann, wie aus Abbildung 7 ersichtlich, zwei verschiedene Phasen gibt, für welche die passende Beschleunigung  $U_0 \cdot \cos(\varphi_s)$  gewährleistet ist.



Eine negative Sollphase ( $\varphi_s < 0$ ) bedeutet dabei, dass sich die Teilchen während der ansteigenden Flanke des  $E_z(t)$ -Feldes durch den Spalt bewegen (Abbildung 7). Teilchen, die den Spalt „früher“ als das Sollteilchen durchlaufen, werden weniger beschleunigt, „späte“ Teilchen durchlaufen ein höheres  $E_z(t)$ -Feld und werden stärker als das Sollteilchen beschleunigt. Für den Punkt mit  $\varphi_s > 0$  kehren sich die Beziehungen um und der Strahl läuft auseinander.



**Abbildung 7 Das Prinzip der Phasenstabilität bei Betrieb mit negativer Sollphase.**

Somit wird nur bei Betrieb mit negativer Sollphase (typischerweise wird  $\varphi_s = -30^\circ$  gewählt) eine stabile longitudinale Bewegung in einem Linearbeschleuniger erreicht. Alle Teilchen mit einer nicht zu großen Energie- und Phasenablage vom Sollteilchen ( $\Delta W_s, \Delta \varphi_s$ ) oszillieren über mehrere Perioden um den Punkt mit stabiler Sollphase  $\varphi_s$  herum, wie in Abbildung 7 angedeutet.

Eine genauere, quantitative Beschreibung der longitudinalen Teilchenbewegung erfolgt im Kapitel 2.2.3.

### 2.2.3. Differentialgleichung der longitudinalen Teilchenbewegung

Ziel der Ausführungen aus diesem Kapitel ist es, eine Bewegungsgleichung für die Teilchenbewegung in longitudinaler Richtung in einem Linearbeschleuniger aufzustellen und unter vereinfachenden Annahmen zu lösen, um eine quantitative Beschreibung dieser Bewegung zu erhalten.

Der entsprechende Formalismus wurde über mehrere Jahrzehnte verfeinert und ist Bestandteil vieler Lehrbücher über Teilchenbeschleuniger. Eine erste umfassende Beschreibung findet man in dem Buch von P. Lapostolle [19]. Die Herleitungen aus dem vorliegenden Kapitel sowie die verwendete Nomenklatur richten sich nach dem Buch von T.P. Wangler [20].

Zur näheren Erläuterung dient auch Abbildung 8. Es werden folgende Indizes verwendet:

$n$  = Nummer der Beschleunigerzelle.

$i$  = Index eines beliebigen Teilchens.

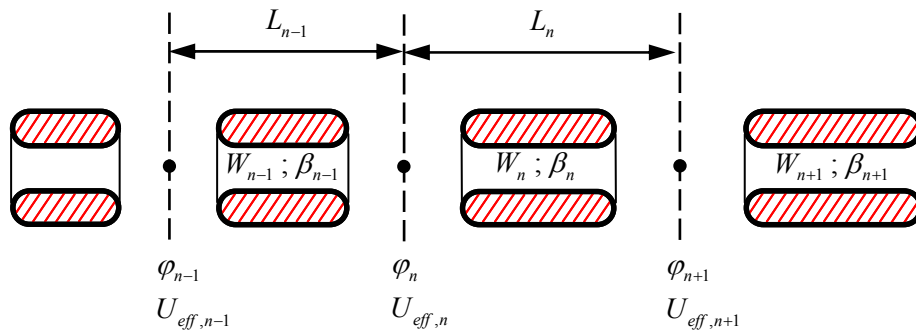
$s$  = Bezeichnung der Parameter des Sollteilchens.

Des Weiteren werden folgende vereinfachenden Annahmen benötigt:

- Die beschleunigende Kraft wirkt auf die Teilchen nur in den Spaltmitten der Zellen  $n$ , in Form einer lokalen Übertragung des gesamten Impulses („thin gap“-Näherung).
- Zwischen zwei aufeinander folgenden Spaltmitten der Zellen  $n$  und  $n+1$  bewegt sich jedes Teilchen  $i$  mit konstanter Geschwindigkeit  $\beta_{n,i}$  und das Sollteilchen mit konstanter Geschwindigkeit  $\beta_{n,s}$ .
- Damit berechnet sich die Entfernung zwischen zwei Spaltmitten („Periodenlänge“, definiert durch das Sollteilchen) wie folgt:

$$L_{n,s} = N \cdot \beta_{n,s} \cdot \lambda,$$

wobei  $N = 1$  für  $\beta\lambda$  Strukturen (z.B. Alvarez-DTL) bzw.  $N = 1/2$  für  $\beta\lambda/2$  Strukturen (z.B. IH-DTL) ist. Im weiteren Verlauf dieses Kapitels werden nur  $\beta\lambda$  Strukturen betrachtet ( $N = 1$ ), um eine ständige Fallunterscheidung zu vermeiden.



**Abbildung 8 Definitionen der Parameter von Beschleunigerzellen zur Beschreibung der longitudinalen Strahldynamik.**

Für die Energiezunahme im Spalt  $n$  gilt jeweils:

$$\Delta W_{n,s} = W_{n,s} - W_{n-1,s} = q \cdot U_{eff,n} \cdot \cos(\varphi_{n,s}),$$

$$\Delta W_{n,i} = W_{n,i} - W_{n-1,i} = q \cdot U_{eff,n} \cdot \cos(\varphi_{n,i})$$

Damit lässt sich die Differenzengleichung für den Unterschied in der Energiezunahme eines beliebigen Teilchens  $i$  relativ zum Sollteilchen wie folgt schreiben:

$$\Delta(W_i - W_s)_n \equiv \Delta W_{n,i} - \Delta W_{n,s} = q \cdot U_{eff,n} \cdot (\cos(\varphi_{n,i}) - \cos(\varphi_{n,s})) \quad (2.11)$$

Um eine entsprechende Beziehung für den Phasenunterschied eines beliebigen Teilchens  $i$  zum Sollteilchen zu gewinnen, geht man wie folgt vor:

- Für das Sollteilchen beträgt der Phasenunterschied zwischen Gap  $n-1$  und Gap  $n$  per Definition  $2\pi$  ( $\beta\lambda$ -Struktur).
- Für ein Teilchen  $i$  ergibt sich  $\Delta\varphi$  aus dem Laufzeitenunterschied und der Berechnung der zurückgelegten Länge  $L_{n-1}$ :

$$\frac{\Delta \varphi_{n,i}}{2\pi} = \frac{T_{n-1,i}}{T_{n-1,s}}; \quad L_{n-1} = v_{n-1,s} \cdot T_{n-1,s} = v_{n-1,i} \cdot T_{n-1,i}$$

$$\text{zu } \Delta \varphi_{n,i} = 2\pi \cdot \frac{T_{n-1,i}}{T_{n-1,s}} = 2\pi \cdot \frac{v_{n-1,s}}{v_{n-1,i}} = 2\pi \cdot \frac{\beta_{n-1,s} \cdot \lambda}{\beta_{n-1,i} \cdot \lambda} = 2\pi \cdot \frac{L_{n-1}}{\beta_{n-1,i} \cdot \lambda}$$



- Für das Sollteilchen kann formal der Index  $i$  durch den Index  $s$  ersetzt werden, wobei sich dann der definitionsgemäße  $2\pi$ -Phasenunterschied ( $\beta\lambda$ -Struktur) ergibt:

$$\Delta\varphi_{n,s} = 2\pi \cdot \frac{L_{n-1}}{\beta_{n-1,s} \cdot \lambda} \equiv 2\pi$$

Aus den letzten beiden Gleichungen gewinnt man folgende Differenzengleichung für den Unterschied in der Phasenänderung eines beliebigen Teilchen  $i$  relativ zum Sollteilchen:

$$\Delta(\varphi_i - \varphi_s)_n \equiv \Delta\varphi_{n,i} - \Delta\varphi_{n,s} = 2\pi \cdot \frac{L_{n-1}}{\lambda} \left( \frac{1}{\beta_{n-1,i}} - \frac{1}{\beta_{n-1,s}} \right) \quad (2.12)$$

Für kleine Abweichungen  $\beta_i = \beta_s + \Delta\beta$ ,  $\Delta\beta \ll 1$  lässt sich Gleichung (2.12) wie folgt umformen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta_{n-1,i}} - \frac{1}{\beta_{n-1,s}} &= \frac{1}{\beta_{n-1,s} + \Delta\beta} - \frac{1}{\beta_{n-1,s}} \approx -\frac{\Delta\beta}{(\beta_{n-1,s})^2} \\ \Rightarrow \Delta(\varphi_i - \varphi_s)_n &= -2\pi \frac{\Delta\beta}{\beta_{n-1,s}} \quad \text{mit} \quad \Delta\beta \equiv \Delta(\beta_i - \beta_s)_n \end{aligned}$$

Setzt man für die relativistische Arbeit folgende Beziehung ein [21]:

$$\Delta W = A \cdot m_0 \cdot \gamma^3 \cdot \mathbf{v} \cdot \Delta \mathbf{v} = A \cdot m_0 \cdot c^2 \cdot \gamma^3 \cdot \beta \cdot \Delta\beta$$

so wird schließlich Gleichung (2.12) zu:

$$\Delta(\varphi_i - \varphi_s)_n = -2\pi \frac{W_{n-1,i} - W_{n-1,s}}{A \cdot m_0 \cdot c^2 \cdot \gamma_{n-1,s}^3 \cdot \beta_{n-1,s}^2} \quad (2.13)$$

Anstelle der diskreten Änderung der Variablen in den Spaltmitten (wie zu Beginn dieses Kapitels erläutert) wird zu einer „kontinuierlichen Betrachtung“ übergegangen, wobei nun die beschleunigenden Felder kontinuierlich entlang der Strahlrichtung  $z$  wirken, in Form einer „mittleren Kraft“.

Damit lassen sich die Differenzenquotienten aus den Gleichungen (2.11) und (2.13) als totale Ableitungen nach  $dz$  ausdrücken:

$$\frac{d(W_i - W_s)}{dz} = q \cdot E_0 \cdot T \cdot (\cos(\varphi_i) - \cos(\varphi_s)) \quad (2.14)$$

und wegen

$$\frac{d(\varphi_i - \varphi_s)}{dz} = \frac{\Delta(\varphi_i - \varphi_s)_n}{L_{n-1}} = \frac{\Delta(\varphi_i - \varphi_s)_n}{\beta_{n-1} \cdot \lambda}$$

wird aus Gleichung (2.13) :

$$\frac{d(\varphi_i - \varphi_s)}{dz} = -2\pi \frac{W_i - W_s}{A \cdot m_0 \cdot c^2 \cdot \gamma_s^3 \cdot \beta_s^3 \cdot \lambda} \quad (2.15)$$

Aus den gekoppelten Differentialgleichungen erster Ordnung (2.14) und (2.15) erhält man durch Ableitung von (2.15) und Einsetzen in (2.14) die Differentialgleichung zweiter Ordnung:

$$\frac{d}{dz} \left[ \gamma_s^3 \cdot \beta_s^3 \cdot \frac{d(\varphi_i - \varphi_s)}{dz} \right] = \frac{-2\pi}{A \cdot m_0 \cdot c^2 \cdot \lambda} \cdot \frac{d(W_i - W_s)}{dz} = \frac{-2\pi q E_0 T}{A \cdot m_0 \cdot c^2 \cdot \lambda} \cdot (\cos(\varphi_i) - \cos(\varphi_s))$$

Dieser Ausdruck lässt sich unter der Annahme, dass die Beschleunigungsrate sehr klein ist, d.h.  $\beta_s \approx \text{const.}$ ,  $\gamma_s \approx \text{const.}$  weiter vereinfachen:

$$\frac{d^2(\varphi_i - \varphi_s)}{dz^2} = \frac{-2\pi q E_0 T}{A \cdot m_0 \cdot c^2 \cdot \gamma_s^3 \cdot \beta_s^3 \cdot \lambda} \cdot (\cos(\varphi_i) - \cos(\varphi_s)) \quad (2.16)$$

Nun kann man beide Seiten der Gleichung (2.16) mit  $\frac{d(\varphi_i - \varphi_s)}{dz}$  multiplizieren, wobei man auf der rechten Seite den identischen Ausdruck  $\frac{d\varphi_i}{dz} = \frac{d(\varphi_i - \varphi_s)}{dz}$  verwenden kann:

$$\frac{d(\varphi_i - \varphi_s)}{dz} \cdot \frac{d^2(\varphi_i - \varphi_s)}{dz^2} = \frac{-2\pi q E_0 T}{A \cdot m_0 \cdot c^2 \cdot \gamma_s^3 \cdot \beta_s^3 \cdot \lambda} \cdot (\cos(\varphi_i) - \cos(\varphi_s)) \cdot \frac{d\varphi_i}{dz}$$

Die Integration über  $dz$  ergibt:

$$\frac{1}{2} \left( \frac{d(\varphi_i - \varphi_s)}{dz} \right)^2 = \frac{-2\pi q E_0 T}{A \cdot m_0 \cdot c^2 \cdot \gamma_s^3 \cdot \beta_s^3 \cdot \lambda} \cdot (\cos(\varphi_i) - \cos(\varphi_s)) \cdot d\varphi_i$$

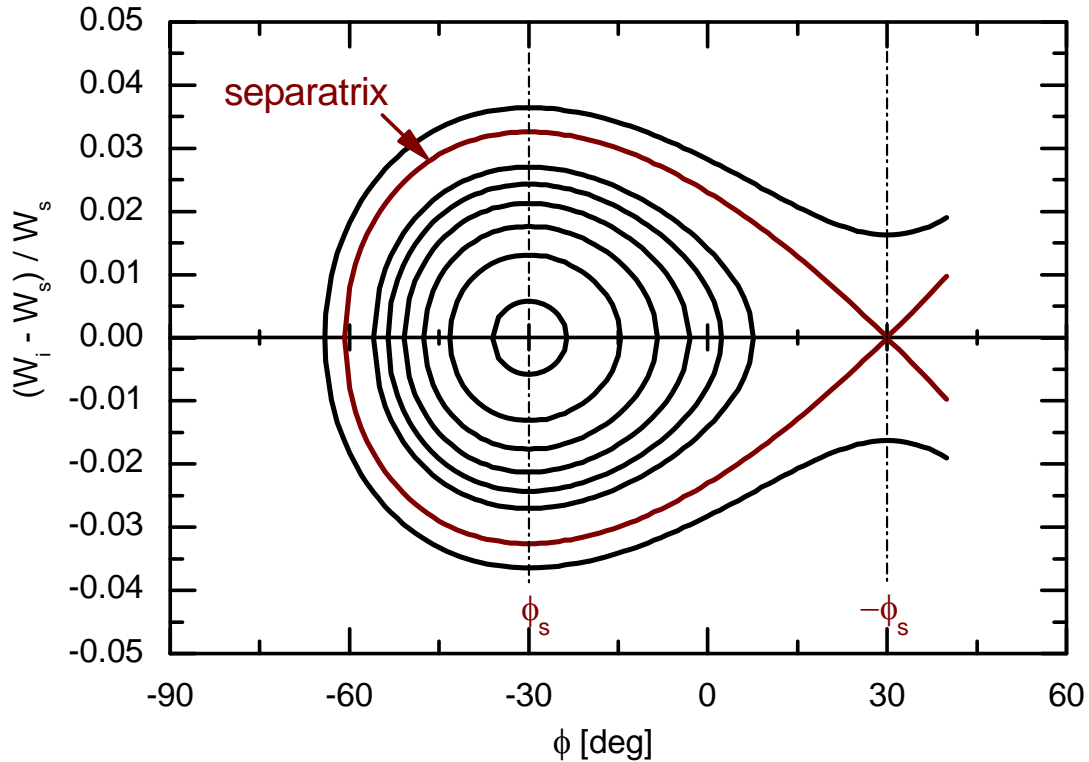
Die linke Seite dieser Gleichung lässt sich unter Verwendung von Gleichung (2.15) umschreiben; auf der rechten Seite wird über  $d\varphi_i$  integriert. Nach weiterem Kürzen und Umformen erhält man schließlich folgenden Ausdruck für die Bewegung der Teilchen im longitudinalen  $(\Delta\varphi, \Delta W)$  Phasenraum:

$$\frac{\pi (W_i - W_s)^2}{A \cdot m_0 \cdot c^2 \cdot \gamma_s^3 \cdot \beta_s^3 \cdot \lambda} + q E_0 T \cdot (\sin(\varphi_i) - \varphi_i \cdot \cos(\varphi_s) + C) = 0 \quad (2.17)$$

Die quadratische Gleichung (2.17) hat die Lösungen:

$$W_i - W_s = \pm \sqrt{\frac{1}{\pi} A \cdot m_0 \cdot c^2 \cdot \gamma_s^3 \cdot \beta_s^3 \cdot \lambda \cdot q E_0 T \cdot (\varphi_i \cdot \cos(\varphi_s) - \sin(\varphi_i) - C)} \quad (2.18)$$

Diese beschreiben Oszillationen im  $\Delta\varphi, \Delta W$  - Phasenraum, wie in Abbildung 9 dargestellt:



**Abbildung 9** Teilcentrajektorien im  $\Delta\varphi, \Delta W$  -Phasenraum.

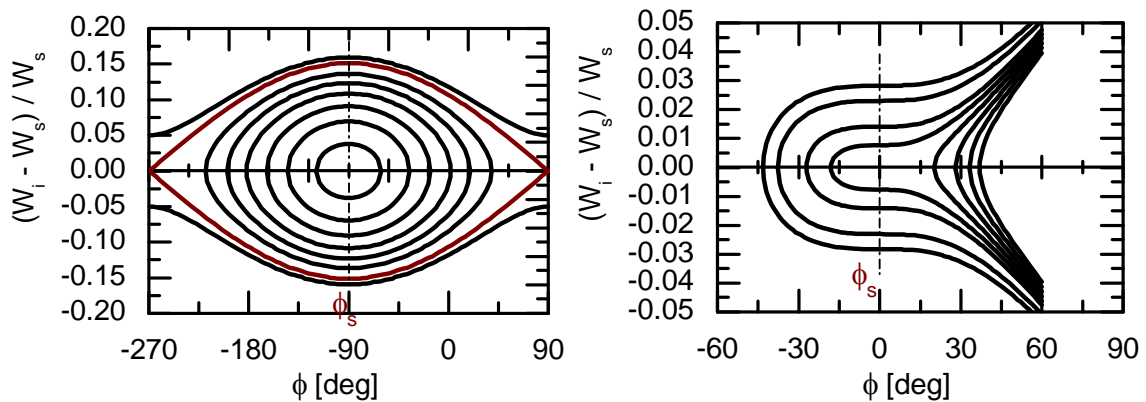
Die verschiedenen Trajektorien gemäß Abbildung 9 gehören zu verschiedenen Werten der Integrationskonstanten  $C$ . Außerdem kann man in Abbildung 9 die zwei stationären Punkte bei  $\varphi_s$  und bei  $-\varphi_s$  erkennen, wie bereits qualitativ im Kapitel 2.2.2 (Abbildung 7) beschrieben.

Wie man ferner aus Abbildung 9 erkennt, stellt die Teilchenbahn durch  $-\varphi_s$  eine obere Grenze für eine stabile Bewegung der Teilchen um das Sollteilchen dar (geschlossene Bahnen im  $\Delta\varphi, \Delta W$  - Phasenraum). Man nennt diese Kurve „Separatrix“ und die darin enthaltene Fläche „Bucket“. Um die Separatrix rechnerisch zu ermitteln, muss in Gleichung (2.18) die Bedingung  $\varphi_i \cdot \cos(\varphi_s) - \sin(\varphi_i) - C = 0$  an der Stelle  $\varphi_i = -\varphi_s$  erfüllt sein.

Somit gilt für die Separatrix:

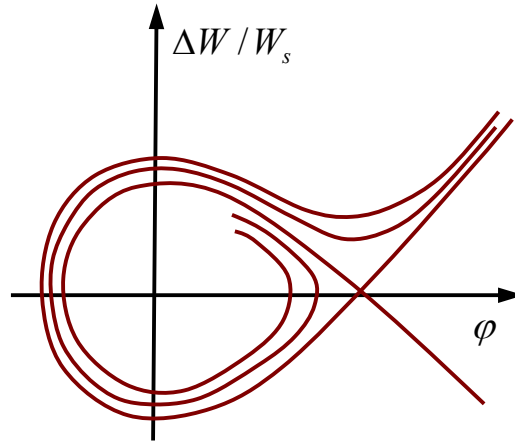
$$C = -(\varphi_s \cdot \cos(\varphi_s) + \sin(-\varphi_s)) \quad (2.19)$$

Die Größe der Separatrix ist von der gewählten Sollphase abhängig, wie aus Abbildung 10 ersichtlich. Sie ist maximal für  $\varphi_s = -90^\circ$  (jedoch findet dann keine Beschleunigung statt!) und verschwindet für  $\varphi_s = 0^\circ$ . Hiermit wird die qualitative Aussage aus Kapitel 2.2.2 ebenfalls bestätigt, dass bei  $\varphi_s = 0^\circ$  keine stabile Bewegung eines Teilchenbündels im longitudinalen Phasenraum möglich ist.



**Abbildung 10 Teilcentrajektorien im  $\Delta\varphi, \Delta W$  -Phasenraum für die beiden Extremfälle  $\varphi_s = -90^\circ$  und  $\varphi_s = 0^\circ$ .**

Es ist jedoch zu beachten, dass der Herleitung der Gleichung (2.18) die Annahme  $\beta_s \approx \text{const.}$ ,  $\gamma_s \approx \text{const.}$  zugrunde liegt. Nur unter dieser Annahme umrandet die Separatrix eine geschlossene Fläche. In einem Linearbeschleuniger öffnet sich bei wachsendem  $\beta_s, \gamma_s$  das Bucket. Außerdem verringert sich die Bucketfläche mit wachsender Teilchenenergie. Jedoch ist es bei einer adiabatischen Änderung von  $\beta_s$  und der Beschleunigungsparameter ( $\varphi_s, E_0$ ) möglich, die im  $\Delta\varphi, \Delta W$  - Phasenraum oszillierenden Teilchen innerhalb der Bucketfläche einzufangen, wie in Abbildung 11 dargestellt. In der Beschleunigergemeinschaft wird für den Bereich der Bucketfläche, innerhalb dessen der Teilcheneinfang stattfindet, der Begriff „Golf Club“ verwendet.



**Abbildung 11 Teilcheneinfang innerhalb der Bucketfläche bei wachsender Teilchengeschwindigkeit („Golf Club“).**

### 2.3. Transversale Strahldynamik

Zunächst müssen die zur Beschreibung der Teilchenbewegung im transversalen Phasenraum verwendeten Koordinaten eingeführt werden.

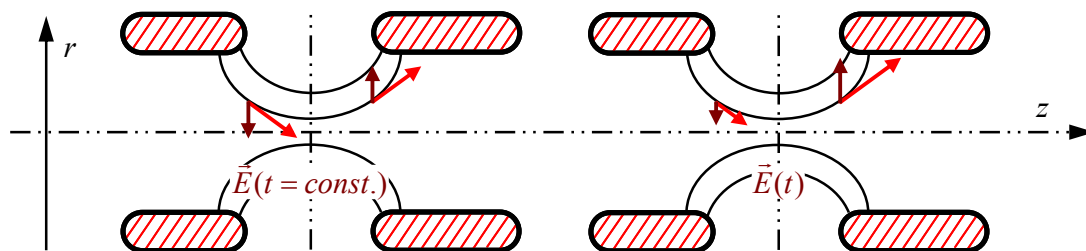
Während es für den longitudinalen Phasenraum zweckmäßig ist, die Größen  $\Delta\varphi, \Delta W$  zu verwenden, um somit einen Bezug zum Sollteilchen ( $\varphi_s, W_s$ ) zu erhalten, können für die beiden transversalen Ebenen die absoluten Orte sowie die transversalen Impulse der Teilchen verwendet werden. Der Bezug zum „Sollteilchen“ ist trivial, da dieses immer auf der Strahlachse bleibt ( $x_s = y_s = 0$ ) und folglich auch keine transversalen Impulse besitzt.

Statt der transversalen Impulse  $p_x, p_y$  werden meistens (auch in der vorliegenden Arbeit) die Winkel  $x', y'$  (in *rad* oder *mrad*) verwendet, welche wie folgt definiert sind:

$$x' = \frac{\Delta x}{\Delta z} = \frac{\beta_x}{\beta_z} \quad ; \quad y' = \frac{\Delta y}{\Delta z} = \frac{\beta_y}{\beta_z}$$

#### 2.3.1. Prinzip der Unmöglichkeit einer gleichzeitigen HF-Fokussierung in longitudinaler und transversaler Richtung

Das elektrische Feld in einem Beschleunigungsspalt hat bei Zylindersymmetrie eine radiale Komponente, welche am Spalteingang nach innen und am Spaltausgang nach außen gerichtet ist, wie man aus Abbildung 12 erkennt:



**Abbildung 12 Zeitlicher Verlauf der Fokussierung und Defokussierung in einem Beschleunigungsspalt.**

Wie im Kapitel 2.2 erläutert, erfordert eine stabile Teilchenbewegung im longitudinalen Phasenraum den Betrieb mit negativer Sollphase, d.h. das  $\vec{E}$ -Feld steigt während des Teilchendurchgangs durch den Spalt an (Abbildung 12, rechts). Somit überwiegt die defokussierende Wirkung der radialen Feldkomponente am Spaltausgang.

Die Unmöglichkeit einer gleichzeitigen HF-Fokussierung in longitudinaler und transversaler Richtung ist ein allgemeines Prinzip, welches erstmals von McMillan [22] formuliert wurde (McMillan-Kriterium). Man erkennt dies sofort, wenn man berücksichtigt, dass in einem mit der Synchronenteilchengeschwindigkeit  $\beta_s$  mitbewegten Bezugssystem (die beschleunigende

HF-Welle wird dann stationär) die Laplacegleichung erfüllt sein muss:  $\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0$ .

Aus der für longitudinale Phasenstabilität notwendigen Bedingung  $\frac{\partial E_z}{\partial z} < 0$  folgt dann:

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} > 0$$

Somit ist eine stabile Teilchenbewegung im longitudinalen Phasenraum mit einer instabilen Bewegung im transversalen Phasenraum verknüpft. Jeder Beschleunigungsspalt trägt dazu bei, dass die Teilchen radial nach außen abgelenkt werden, was zunächst ein großes Problem für die Entwicklung von HF-Linearbeschleunigern darstellte.

Zu diesem Effekt kommen noch transversale Geschwindigkeitskomponenten aus der Ionenquelle, die Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung (abstoßende Raumladungskraft) usw. hinzu. Ohne weitere Maßnahmen würden sich die Teilchen immer mehr von der Sollbahn entfernen und schließlich die Vakuumkammer berühren.

Eine transversale Fokussierung der Teilchen mittels äußerer elektrischer oder magnetischer Felder ist also unerlässlich.

Die gängigsten im Bereich von Driftröhren-Linearbeschleunigern eingesetzten Fokussierungselemente sind Quadrupollinsen, wie im nächsten Kapitel beschrieben.

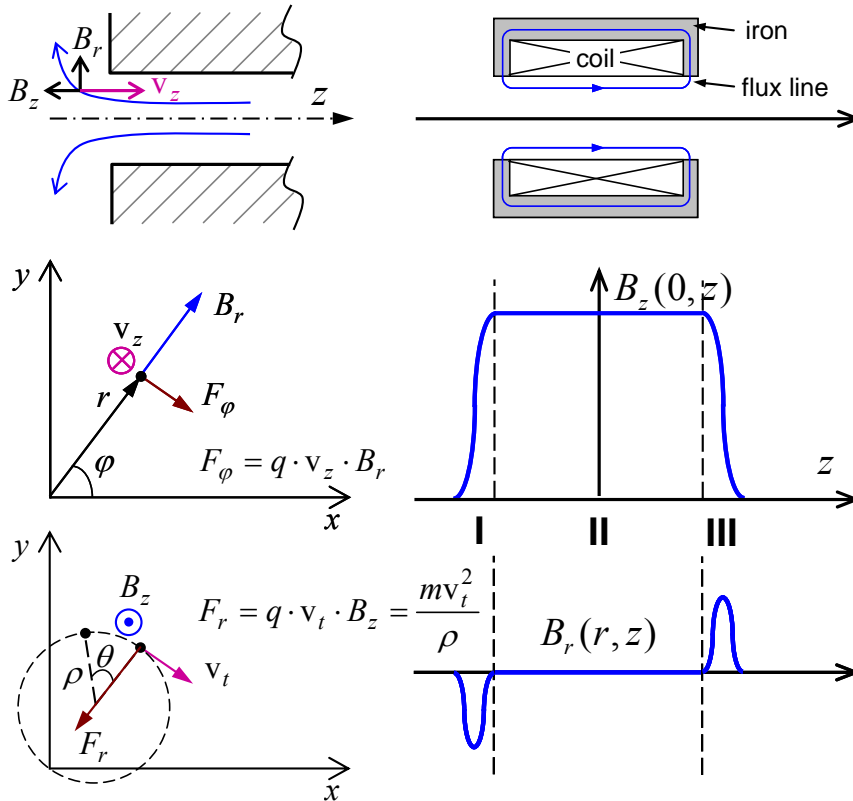
### 2.3.2. Transversale Fokussierungselemente

#### Solenoid

Damit eine Linse linear abbildet, muss die Fokussierungskraft in radialer Richtung linear ansteigen. Ferner muss die Fokussierung achsensymmetrisch erfolgen.

Das einfachste System, welches diese Bedingungen erfüllt, ist eine stromdurchflossene Spule (Solenoid), deren Wirkungsweise in Abbildung 13 veranschaulicht wird.

Im Inneren der Spule (Zone II in Abbildung 13) ist das  $\vec{B}$ -Feld rein longitudinal. Wegen  $\text{div}\vec{B} = 0$  gibt es im Randbereich (Zonen I und III) eine Radialkomponente  $B_r$ . Somit erfahren die Teilchen beim Durchlaufen der Randzone eine Azimuthalkraft  $F_\varphi$ . Durch die damit verbundene Geschwindigkeitskomponente  $v_t$  in der transversalen Ebene wirkt im zentralen Bereich des Solenoiden eine radiale Kraft  $F_r$ . Dadurch bewegen sich die Teilchen im Bereich mit homogenem longitudinalen  $\vec{B}$ -Feld auf Schraubenbahnen mit Radius  $\rho$  (vergl. Abbildung 13), welche durch den Koordinatenursprung (Strahlachse  $z$ ) verlaufen, d.h. die Solenoidlinse wirkt fokussierend und besitzt einen eindeutigen Brennpunkt.



**Abbildung 13** Beschreibung der Teilchenbewegung in Solenoidlinsen.

Die Brennweite  $f$  des Solenoiden ist bestimmt durch [23]:

$$\frac{1}{f} = -\frac{r'}{r} = \left( \frac{q}{2\gamma m_0 \beta_z c} \right)^2 \cdot \int B_z^2(0, z) dz \quad (2.20)$$

Wegen der quadratischen Abhängigkeit von  $B_z$  ist die Fokussierungsstärke des Solenoiden jedoch relativ schwach im Vergleich zu Quadrupollinsen.

Für einen magnetischen Quadrupol ergibt sich (ebenfalls aus [23]):

$$\frac{1}{f} = \pm \frac{qB_0}{\gamma m_0 \beta_z c \cdot a} \quad (2.21)$$

Wobei  $B_0$  die maximale Polschuh-Feldstärke und  $a$  der Aperturradius der Quadrupollinse ist. Wie man sieht, geht die Magnetfeldstärke beim Quadrupol nur linear in die Fokussierungsstärke ein.

Deshalb sind die im relevanten Energiebereich von Driftröhrenbeschleunigern vorwiegend eingesetzten Fokussierungselemente magnetische Quadrupole, während Solenoidlinsen vorwiegend im Niederenergiebereich eingesetzt werden.

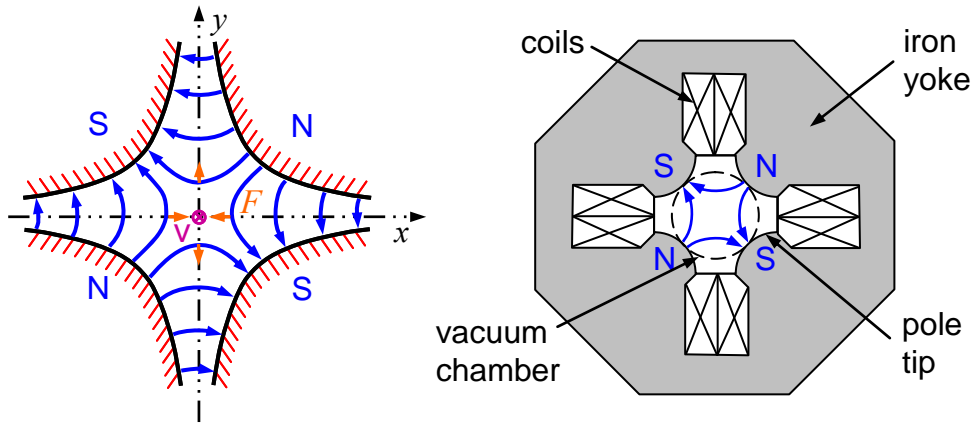
Allerdings muss beim Quadrupol auf die Rotationssymmetrie der Fokussierung verzichtet werden!

### Magnetische Quadrupollinsen

Quadrupolfelder besitzen zwei transversale Symmetrieebenen (zum Vergleich Abbildung 14 und Abbildung 15) und sind ein Spezialfall von zylindrischen Multipolfeldern mit 2n-Symmetrie.

Wie bereits im vorherigen Abschnitt erläutert, kann wegen des Verlustes der Radialsymmetrie nur noch in einer der Symmetrieebenen (z.B. nur in der x-z-Ebene, vergl. Abbildung 14)

fokussiert werden, während der Strahl in der anderen Ebene defokussiert wird. Diesen Nachteil kann man dadurch beheben, dass zwei Quadrupollinsen mit unterschiedlicher Polung hintereinander geschaltet werden. Die Gesamtwirkung in beiden transversalen Ebenen ist dann fokussierend (Prinzip der „Starken Fokussierung“, vergl. Abschnitt 2.3.3).



**Abbildung 14** Magnetische Feldlinien in einem idealen Quadrupol (hyperbolische Polschuhe) sowie Schema einer technischen Realisierung.

Wie man aus Abbildung 14 und Abbildung 15 erkennt, bestehen Quadrupollinsen aus vier hyperbolisch geformten Polen. Beim magnetischen Quadrupol sind diese aus Eisen (Abbildung 14, rechts) und werden durch Spulen alternierender Polarität erregt. Für die technische Realisierung können die Polschuhe nur annähernd hyperbolisch geformt werden. Der gesamte Aufbau kann beim Linearbeschleuniger vom Alvarez-Typ (vergl. Kapitel 2.1 und Abbildung 2) in das Driftröhrengehäuse eingebaut werden. Die Stromversorgung und eventuell Kühlung erfolgt durch den Driftröhrenhalter („Stem“). Wegen der relativ starken radialen HF-Defokussierung in den Beschleunigungsspalten bei Betrieb mit negativer Sollphase ist es meistens notwendig, magnetische Quadrupole in jede Alvarez-Driftröhre zu integrieren.

Bei H-Mode-Kavitäten werden längere Quadrupole - meist als Triplets angeordnet - in größeren Abständen voneinander eingesetzt („KONUS“-Strahldynamik, vergl. Kapitel 3.1). Dadurch können diese in separaten Gehäusen zwischen den Resonatorstrukturen montiert werden. Nur bei niedrigen Teilchengeschwindigkeiten und entsprechend hoher Linsendichte kann es notwendig sein, die Quadrupol-Triplets in den Tank zu integrieren (Abbildung 3).

Das hyperbolische Profil der Polschuhe ist für einen konstanten Anstieg der magnetischen Feldstärke (konstanter Feldgradient  $B'$ ) notwendig, weil die magnetische Linse nur dann lineare Abbildungseigenschaften hat:

$$B' = \frac{\partial B_x}{\partial y} = \frac{\partial B_y}{\partial x} = \text{const} \quad (2.22)$$

Die Magnetfeldkomponenten  $B_x, B_y$  können formal von einem skalaren magnetischen Potential  $\psi$  abgeleitet werden:

$$\psi \equiv -B' \cdot x \cdot y \Rightarrow B_x = -\frac{\partial \psi}{\partial x} = B' \cdot y = \frac{B_0}{a} \cdot y \quad ; \quad B_y = -\frac{\partial \psi}{\partial y} = B' \cdot x = \frac{B_0}{a} \cdot x$$

Dabei ist  $a$  die Apertur des Quadrupols, d.h. der minimale Abstand von der Polschuhoberfläche zur Strahlachse, und  $B_0$  die Feldstärke auf dem Polschuh.

Die Kraftkomponenten auf bewegte Teilchen im Quadrupolfeld ergeben sich aus der Lorentzkraft  $\vec{F}_L = q \cdot \vec{v} \times \vec{B}$  zu:

$$\begin{aligned} F_x &= \gamma m_0 \ddot{x} = -q v_z B_y = -q v B' \cdot x \\ F_y &= \gamma m_0 \ddot{y} = +q v_z B_x = +q v B' \cdot y \end{aligned}$$

Dabei wird  $v_x \cong v_y \ll v_z \equiv v$  angenommen.

Wandelt man die Zeitableitung in eine Ortsableitung um:

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = \frac{dx}{dz} \cdot \frac{dz}{dt} = x' \cdot v$$

so erhält man folgende Differentialgleichungen für die Transversalbewegung der Teilchen im magnetischen Quadrupolfeld:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 x}{dz^2} + \frac{q B'}{\gamma m_0 v} \cdot x &= 0 \\ \frac{d^2 y}{dz^2} - \frac{q B'}{\gamma m_0 v} \cdot y &= 0 \end{aligned} \quad (2.23)$$

Mit den Anfangsbedingungen  $x = x_0$ ;  $x' = x'_0$ ;  $y = y_0$ ;  $y' = y'_0$  für  $z = 0$  haben diese folgende Lösungen:

$$\begin{aligned} x &= x_0 \cos \sqrt{\kappa} z + \frac{x'_0}{\sqrt{\kappa}} \sin \sqrt{\kappa} z \\ y &= y_0 \cosh \sqrt{\kappa} z + \frac{y'_0}{\sqrt{\kappa}} \sinh \sqrt{\kappa} z \end{aligned} \quad (2.24)$$

Dabei ist der Faktor  $\kappa$  gemäß Gleichung (2.23) wie folgt definiert:

$$\kappa \equiv \kappa_B = \frac{q B'}{\gamma m_0 v} = \frac{q B_0}{\gamma m_0 v \cdot a} \quad (2.25)$$

Man nennt diese Größe magnetische Fokussierungsstärke. Der Index  $B$  signalisiert, dass es sich um den magnetischen Quadrupol handelt. Im nächsten Abschnitt wird ein entsprechender Ausdruck für die Fokussierungsstärke  $\kappa_E$  des elektrostatischen Quadrupols hergeleitet.

Die Kosinus-Funktion in den Gleichungen (2.24) beschreibt eine Teilchenbewegung zur Strahlachse hin, d.h. die magnetische Linse ist in der  $x$ - $z$ -Ebene fokussierend. Entsprechend beschreibt der Kosinus Hyperbolicus eine Bewegung von der Strahlachse weg, d.h. eine defokussierende Linse in der  $y$ - $z$ -Ebene.

Durch Ableiten der Gleichungen (2.24) können Ausdrücke für  $x'$ ,  $y'$  gewonnen werden.

Diese können zusammen mit den Gleichungen (2.24) kompakt in der Matrixschreibweise dargestellt werden.

- Für die fokussierende Ebene:

$$\begin{pmatrix} x \\ x' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \sqrt{\kappa} z & \frac{1}{\sqrt{\kappa}} \sin \sqrt{\kappa} z \\ -\sqrt{\kappa} \sin \sqrt{\kappa} z & \cos \sqrt{\kappa} z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_0 \\ x'_0 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

- Für die defokussierende Ebene:

$$\begin{pmatrix} y \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \sqrt{\kappa} z & \frac{1}{\sqrt{\kappa}} \sinh \sqrt{\kappa} z \\ \sqrt{\kappa} \sinh \sqrt{\kappa} z & \cosh \sqrt{\kappa} z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_0 \\ y'_0 \end{pmatrix} \quad (2.27)$$



Die Gleichungen (2.26) und (2.27) reichen vollständig aus, um die Teilchenbahnen in einem magnetischen Quadrupol zu beschreiben, sofern keine weiteren Effekte, wie zum Beispiel die Teilchen-Teilchen- Wechselwirkung auftreten.

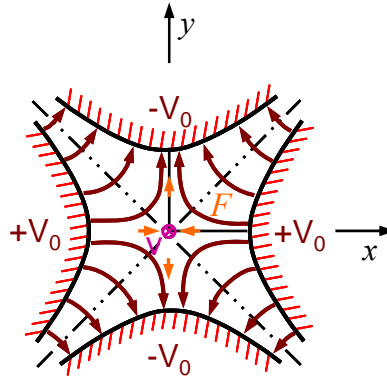
Jedoch ist dabei die Länge  $z$  (= Länge in Strahlrichtung, entlang welcher ein Quadrupolfeld  $B_x(z), B_y(z)$  vorhanden ist) nicht genau bestimmt. Es wird vielmehr davon ausgegangen, dass das transversale Quadrupolfeld im Inneren der Linse konstante Stärke aufweist ( $\kappa_B \sim B_0/a$ ) und dann abrupt auf Null abfällt. Diese Näherung nennt man „Hard-Edge-Approximation“, d.h. es gibt eine scharfe Kante für den Feldabfall. In Wirklichkeit hat der magnetische Quadrupol an seinen Enden Randfelder, die einen ähnlichen Abfall aufweisen, wie in Abbildung 13 für die  $B_z$ -Komponente des Solenoidfeldes anskizziert.

Um diese zu berücksichtigen, darf in den Gleichungen (2.26) und (2.27) für  $z$  nicht die geometrische Polschuh-Länge  $L_{geom}$  eingesetzt werden, sondern eine effektive Länge  $L_{eff}$ , welche sich wie folgt bestimmen lässt:

$$\Delta z = L_{eff} = \frac{1}{B_0} \cdot \int_{z_1}^{z_2} B_z(0, z) dz$$

### Elektrostatische Quadrupollinsen

Die Herleitung der Bewegungsgleichungen für geladene Teilchen beim Durchgang durch einen elektrostatischen Quadrupol (Abbildung 15) erfolgt analog zum magnetostatischen Quadrupol.



**Abbildung 15 Elektrische Feldlinien in einem elektrostatischen Quadrupol mit hyperbolisch geformten Elektroden.**

Die Elektroden bilden ebenfalls hyperbolische Flächen (Äquipotentialflächen), welche wie folgt definiert sind:

$$\text{Elektrodenpaar I : } \frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{a^2} = +1$$

$$\text{Elektrodenpaar II : } \frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{a^2} = -1$$

Mit den Randbedingungen  $V = \pm V_0$  auf den Elektroden und  $V = 0$  auf den Asymptoten lässt sich das dazugehörige elektrische Potential wie folgt angeben:

$$V(x, y) = \frac{V_0}{a^2} (x^2 - y^2) = \frac{E'}{2} \cdot (x^2 - y^2)$$

Hierbei wurde analog zur Gleichung (2.22) ein elektrischer Feldgradient  $E'$  definiert:

$$E' \equiv \frac{2V_0}{a^2} \quad (2.28)$$

Die dazugehörigen  $\vec{E}$ -Feldkomponenten sind:

$$\begin{aligned} E_x &= -\frac{\partial V}{\partial x} = -\frac{2V_0}{a^2} x = -E' \cdot x = -\frac{E_0}{a} \cdot x \\ E_y &= -\frac{\partial V}{\partial y} = +\frac{2V_0}{a^2} y = +E' \cdot y = +\frac{E_0}{a} \cdot y \end{aligned}$$

Die Kraftkomponenten auf bewegte Teilchen im Feld des elektrostatischen Quadrupols sind wie beim magnetostatischen Quadrupol linear:

$$\begin{aligned} F_x &= \gamma m_0 \ddot{x} = q E_x = -q E' \cdot x \\ F_y &= \gamma m_0 \ddot{y} = q E_y = +q E' \cdot y \end{aligned}$$

Wandelt man die Zeitableitung wieder in eine Ortsableitung um ( $\dot{x} = x' \cdot v$ ), so erhält man folgende Differentialgleichungen für die Transversalbewegung der Teilchen im elektrostatischen Quadrupolfeld:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 x}{dz^2} + \frac{q E'}{\gamma m_0 v^2} \cdot x &= 0 \\ \frac{d^2 y}{dz^2} - \frac{q E'}{\gamma m_0 v^2} \cdot y &= 0 \end{aligned} \quad (2.29)$$

Diese haben die gleiche Form wie die Gleichung (2.23), weshalb auch die Lösungen identisch angegeben werden können, entsprechend der Gleichungen (2.26) und (2.27). Darin ist lediglich für den Faktor  $\kappa$  die Fokussierungsstärke des elektrischen Quadrupols einzusetzen. Aus Gleichung (2.29) wird diese wie folgt definiert:

$$\kappa \equiv \kappa_E = \frac{q E'}{\gamma m_0 v^2} = \frac{q E_0}{\gamma m_0 v^2 \cdot a} \quad (2.30)$$

Vergleicht man  $\kappa_E$  mit  $\kappa_B$  aus Gleichung (2.25), so ist:

$$\frac{\kappa_E}{\kappa_B} = \frac{E_0}{v \cdot B_0} \quad (2.31)$$

Man erkennt darin, dass hohe Teilchengeschwindigkeiten die Wirkungsweise magnetischer Linsen gegenüber den elektrischen Quadrupolen stetig verbessern, d.h. die Fokussierungskraft nimmt weniger stark ab. Dies hat seinen Ursprung im Kreuzprodukt  $\vec{v} \times \vec{B}$  für die Lorentzkraft:  $\vec{F}_L = q \cdot (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$ .

Setzt man  $\kappa_E = \kappa_B$ , so lässt sich die Teilchenenergie abschätzen, ab welcher ein magnetischer Quadrupol eingesetzt werden muss:

$$\kappa_E = \kappa_B \Leftrightarrow E_0 \left[ \frac{\text{MV}}{\text{m}} \right] = 300 \cdot \beta \cdot B_0 [T] \quad (2.32)$$

Geht man von einer durch Überschläge auf 10 MV/m begrenzten maximalen elektrischen Feldstärke und einer durch Sättigung auf 1.3 T begrenzten Magnetfeldstärke aus, so beträgt  $\beta = 0.025$  bzw.  $W = 270 \text{ keV/u}$ .

Elektrostatische Quadrupole sollten demnach in einem Linearbeschleuniger nur im Niederenergie-Strahltransportbereich gleich nach der Ionenquelle eingesetzt werden.

### 2.3.3. Prinzip der „Starken Fokussierung“

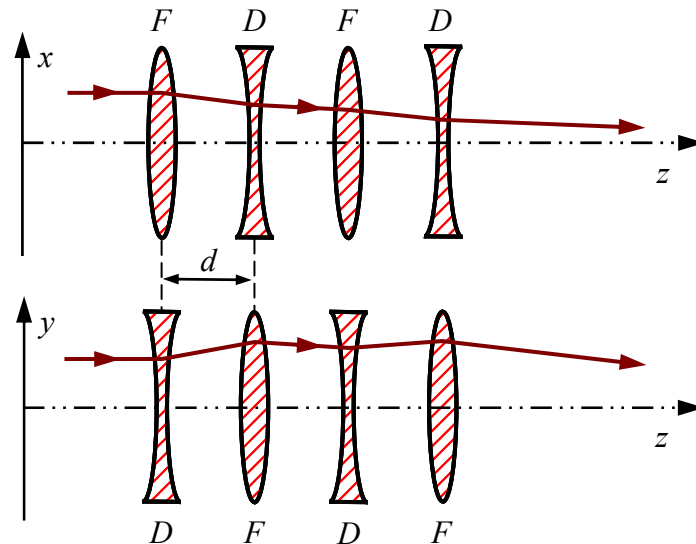
Im vorhergehenden Abschnitt wurde erläutert, dass magnetische Quadrupollinsen die effektivsten und geläufigsten Fokussierungselemente für Driftröhren-Linearbeschleuniger bei mittleren Teilchenenergien darstellen. Jedoch haben diese den Nachteil, dass sie jeweils in einer transversalen Ebene (z.B. in der  $x$ - $z$  Ebene) fokussierend und in der anderen (z. B. in der  $y$ - $z$  Ebene) defokussierend wirken.

Dieses Problem kann dadurch behoben werden, dass man ein Linsenpaar mit unterschiedlicher Polarität (ein sogenanntes Duplett) bildet. Ein solches Linsenpaar wirkt immer fokussierend. Die Brennweite  $F$  einer Doppellinse beträgt [21]:

$$\frac{1}{F} = \frac{1}{f_1} + \frac{1}{f_2} - \frac{d}{f_1 \cdot f_2} \quad (2.33)$$

Dabei sind  $f_1$  und  $f_2$  die Brennweiten der Einzellinsen und  $d$  der Linsenabstand (vergl. Abbildung 16). Wenn die Linsen gleich stark sind (d.h.  $f_2 = -f_1$ ), bleibt in Gleichung (2.33) nur der dritte Term (mit positivem Vorzeichen) übrig, woran man erkennt, dass ein solches Doppellinsensystem immer fokussierend wirkt. Die Brennweite  $F$  lässt sich in diesem Fall über den Abstand  $d$  der Einzellinsen einstellen.

Schaltet man mehrere Quadrupollinsen mit abwechselnder Polarität hintereinander, wie in Abbildung 16 dargestellt, so kann immer eine Netto-Fokussierung in beiden transversalen Ebenen erreicht werden. Man nennt diese Eigenschaft das Prinzip der „Starken Fokussierung“, oder auch „Alternierende Gradientenfokussierung“ (AG Fokussierung). Dieses Prinzip wurde um das Jahr 1950 von Courant und Snyder entdeckt und formuliert [24] und ermöglichte es, auch längere Linearbeschleuniger mit höheren Endenergien zu bauen, da man erstmals eine Möglichkeit gefunden hatte, den Strahl auch transversal über viele Strukturperioden stabil zu transportieren.



**Abbildung 16** Wirkungsweise der „Starken Fokussierung“, auch „Alternierende Gradientenfokussierung“ (AG Fokussierung) genannt.

Die Theorie des „Alternierenden-Gradient-Synchrotrons“ von Courant und Snyder [25] wurde zwar, wie der Name es besagt, für Kreisbeschleuniger entwickelt, lässt sich aber entsprechend auf alle periodischen Strukturen übertragen wie zum Beispiel Strahltransportstrecken oder streng periodische Abschnitte eines Linearbeschleunigers, wenn die Beschleunigungsrate entsprechend klein ist.

Die notwendige Periodizität des Quadrupolkanals kann auf vielfältige Weise durch Kombination der Polarität aufeinanderfolgender Linsen erreicht werden. Eine Strukturperiode ist dadurch definiert, dass sich die Abfolge der Linsenpolaritäten wiederholt.

Die einfachste Anordnung ist in Abbildung 16 dargestellt: In diesem Fall besteht eine Strukturperiode aus einem fokussierenden Quadrupol **F**, einem feldfreien Zwischenraum **0** („Driftstrecke“), einem defokussierenden Quadrupol **D** und einer weiteren Driftstrecke **0** bis zum Anfang der nächsten Strukturperiode.

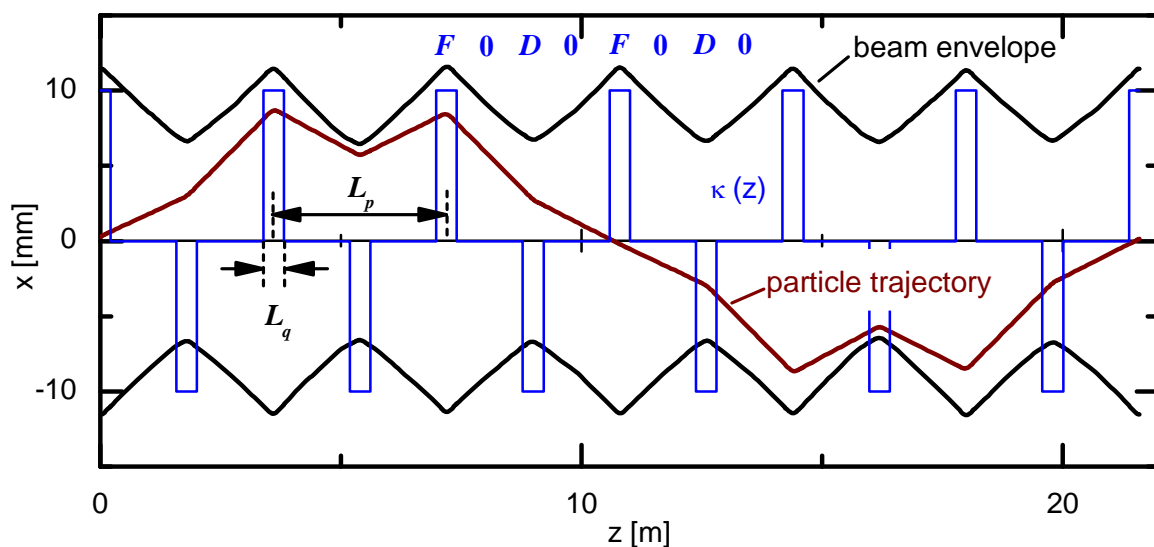
Man nennt diese Anordnung deshalb auch **F0D0** – Kanal. Die meisten Linearbeschleuniger vom Alvarez-Typ haben die **F0D0** – Zelle als Grundeinheit für die transversale Teilchenbewegung. Die einzelnen Quadrupollinsen werden dabei in die Driftröhren-Gehäuse integriert. Anstelle der feldfreien Driftstrecke „0“ treten allerdings die unterschiedlichen Effekte im HF-Gap auf, wobei für die Stabilitätsbetrachtung der transversalen Bewegung die defokussierende Wirkung der  $E_r$ -Komponenten bei Betrieb mit negativer Sollphase die wichtigste Rolle spielt.

#### 2.3.4. Transversale Teilchenbewegung im periodisch fokussierenden Quadrupolkanal (F0D0 – Lattice)

Zunächst werden die Eigenschaften eines F0D0-Kanals nur aus Quadrupollinsen bestehend untersucht.

Der entsprechende Formalismus wurde, wie bereits im vorherigen Abschnitt erwähnt, von Courant und Snyder [25] erstmals formuliert. Die nachfolgenden Herleitungen sowie die verwendete Nomenklatur erfolgen in starker Anlehnung an das Buch von M. Reiser [23].

In Abbildung 17 wird die transversale Teilchenbewegung in einem F0D0-Kanal qualitativ beschrieben. Alle Quadrupollinsen haben die effektive Länge  $L_q$  und die Fokussierungsstärke  $\kappa$  gemäß Gleichung (2.25), mit abwechselnder Polarität. Die F0D0-Strukturperiode hat die Länge  $L_p$ , was dem doppelten Linsenabstand entspricht. In der Farbe dunkelrot ist die Bahn eines beliebigen Einzelteilchens zu sehen. Die schwarzen Kurven bilden die Einhüllenden der Bahnen aller Teilchen, welche „Strahlenveloppen“ genannt werden.



**Abbildung 17** Bahn eines Einzelteilchens sowie Einhüllende aller Teilchenbahnen („Envelope“) in einem F0D0-Kanal, bei einem transversalen Phasenvorschub  $\sigma_t = 60^\circ$ .

Wie man aus Abbildung 17 erkennt, hat die Periodizität der Fokussierung auch eine periodische Oszillation der Strahlenvelope zur Folge. Dabei wird die maximale transversale Strahlausdehnung im Bereich des fokussierenden Quadrupols erreicht und entsprechend die minimale Ausdehnung im Bereich des defokussierenden Quadrupols.

Man spricht von einem „angepassten Strahl“, wenn die Projektion der Koordinaten aller Teilchen in der  $xx'$ - und der  $yy'$ -Ebene nach Durchlaufen einer Strukturperiode die Form und Orientierung beibehält. Insbesondere hat die Strahlenvelope die gleiche Ausdehnung wie zu Beginn der Periode, wie aus Abbildung 17 ersichtlich, und die Periodenlänge der Enveloppen-Oszillation ist gleich der Strukturperiodenlänge  $L_p$ .

Jedes Einzelteilchen hingegen oszilliert mit einer anderen Frequenz um die Strahlachse. Im Beispiel aus Abbildung 17 benötigt das Einzelteilchen 6 Strukturperioden für eine volle  $360^\circ$ -Oszillation. Bei festgehaltenen Geometrieparametern (d.h. Quadrupollänge  $L_q$  und Linsenabstand  $L_p / 2$ ) kann man durch Variation der Fokussierungsstärke  $\kappa$  auch die Frequenz der Einzelteilchenoszillationen beeinflussen.

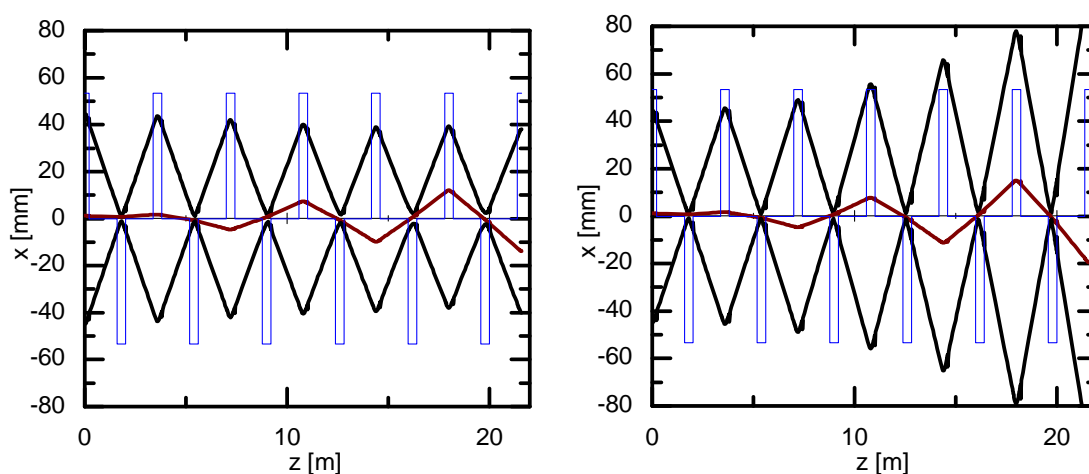
Es bietet sich daher an, den Parameter „transversaler Phasenvorschub pro Strukturperiode“  $\sigma_t$  wie folgt zu definieren:

$$N_p = \frac{2\pi}{\sigma_t} = \frac{360^\circ}{\sigma_t[\text{deg}]} \quad (2.34)$$

Dabei ist  $N_p$  die Anzahl von Strukturperioden, die für eine volle Einzelteilchenoszillation benötigt werden. Im Beispiel aus Abbildung 17 ist  $\sigma_t = 60^\circ$

Der transversale Phasenvorschub ist somit sowohl ein Maß für die Fokussierungsstärke der verwendeten Quadrupole, als auch ein geeigneter Parameter um die Stabilität der transversalen Teilchenbewegung zu untersuchen.

Das Stabilitätskriterium lautet  $\sigma_t < 180^\circ$  und lässt sich wie folgt erklären: Für  $\sigma_t = 180^\circ$  ist  $N_p = 2$ , d.h. das Einzelteilchen vollbringt entlang einer Strukturperiode  $L_p$  eine  $180^\circ$ -Oszillation. Dies bedeutet aber, dass die Brennweite eines einzelnen Quadrupols gleich dem Linsenabstand  $L_p / 2$  ist. Dadurch bleibt die nachfolgende Linse mit entgegengesetzter Polarität wirkungslos (die Teilchen haben einen achsennahen Durchgang, wie aus Abbildung 18 ersichtlich). Die Oszillationen um die Strahlachse werden im Wesentlichen von jeder zweiten Linse mit gleicher Polarität verursacht und verstärken sich von Periode zu Periode. Für  $\sigma_t > 180^\circ$  ist die Brennweite der Einzellinsen sogar kleiner als der Linsenabstand, so dass der beschriebene Effekt noch stärker auftritt.



**Abbildung 18** Strahlenveloppen nahe am Stabilitätslimit ( $\sigma_t = 175^\circ$ , links) sowie jenseits des Stabilitätslimits ( $\sigma_t > 180^\circ$ , rechts).

An dieser Stelle sei jedoch erwähnt, dass es mit steigendem Strahlstrom  $I$  bedingt durch die Eigenfelder des Strahls zu einer deutlichen Absenkung des gemäß Gleichung (2.34) definierten Phasenvorschubs kommen kann. Ist der „Nullstrom-Phasenvorschub“ oberhalb von  $90^\circ$  und fällt dieser Wert bei Variation des Strahlstroms unterhalb von  $90^\circ$  ab, so kann diese Absenkung zu einem resonanten Verhalten bei  $\sigma_{t,I \neq 0} = 90^\circ$  und damit verbundenen Instabilitäten führen. Hierzu gibt es zahlreiche Untersuchungen, welche z.B. in den Referenzen [20] und [23] umfassend beschrieben werden. Daher gilt bei nicht vernachlässigbarem Strahlstrom das „strengere“ Stabilitätskriterium  $\sigma_{t,I \neq 0} < 90^\circ$ .

Eine quantitative Beschreibung der Teilchenbewegung in einem periodischen, stark fokussierenden Quadrupolfeld liefert, wie bereits erwähnt, die Theorie von Courant und Snyder [25].

Analog zur Differentialgleichung (2.23) des einzelnen Quadrupols lauten die Differentialgleichungen eines periodischen Fokussierungssystems:

$$\begin{aligned}\frac{d^2 x}{dz^2} + \kappa_x(z) \cdot x &= 0 \\ \frac{d^2 y}{dz^2} + \kappa_y(z) \cdot y &= 0\end{aligned}\tag{2.35}$$

Dabei ist  $\kappa(z)$  die durch die Variation des Quadrupol-Magnetfeldes entlang  $z$  gegebene Fokussierungsstärke. Für Quadrupole in der „Hard-Edge-Approximation“ (vergl. Abschnitt 2.3.2) ist  $\kappa(z) = \pm \frac{q B_0}{\gamma m_0 v \cdot a}$  entlang der effektiven Länge der Quadrupole und sonst 0 (vergl.

blaue Kurve in Abbildung 17 und Abbildung 18).

$\kappa(z)$  erfüllt also folgende Periodizitätsbedingung für die Strukturperiode  $L_p$ :

$$\kappa(z + L_p) = \kappa(z)\tag{2.36}$$

Gleichung (2.35) hat die Form der Hill'schen Differentialgleichung [26], d.h. einer linearen Differentialgleichung mit periodischen Koeffizienten und ohne Terme der ersten Ableitung. Sie lässt sich formal in Matrixform wie folgt ausdrücken:

$$\frac{d^2 x}{dz^2} + \kappa_x(z) \cdot x = 0 \Leftrightarrow \frac{d}{dz} \begin{pmatrix} x(z) \\ x'(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\kappa_x(z) & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x(z) \\ x'(z) \end{pmatrix}\tag{2.37}$$

Unabhängig von der Periodizität von  $\kappa(z)$  kann durch Integration von Gleichung (2.37) eine Lösung der Hill'schen Differentialgleichung in der Matrixdarstellung folgendermaßen angegeben werden:

$$\begin{pmatrix} x(z) \\ x'(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_0(z_0) \\ x'_0(z_0) \end{pmatrix} = M(z | z_0) \cdot \begin{pmatrix} x_0(z_0) \\ x'_0(z_0) \end{pmatrix}\tag{2.38}$$

Die Teilchenkoordinaten an einem beliebigen Ort  $z$  hängen also nur von den Anfangsbedingungen  $(x_0, x'_0)$  bzw.  $(y_0, y'_0)$  ab.

Die Koeffizienten der „Transfermatrix“  $M(z | z_0)$  ergeben sich durch Matrixmultiplikation über alle zu einer Strukturperiode dazugehörigen Elemente.

Für den F0D0-Kanal lautet demzufolge die Transfermatrix über eine Strukturperiode:

$$M_{F0D0} = M_0 \times M_D \times M_0 \times M_F\tag{2.39}$$

Dabei bezeichnen  $M_F, M_D$  die fokussierenden bzw. defokussierenden Transfermatrizen der einzelnen Quadrupole gemäß Gleichungen (2.26) und (2.27).  $M_0$  ist die Transfermatrix einer

Driftstrecke. Mit  $L_d$  = Länge der Driftstrecke lässt sich  $M_0$  wie folgt schreiben:

$$M_0 = \begin{pmatrix} 1 & L_d \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

In einem periodischen System muss die Transfermatrix nach Durchlaufen einer Strukturperiode  $L_p$  folgende Eigenschaft besitzen:

$$M(z + L_p | z) = M(z)$$

Dies bedeutet, dass die Transfermatrizen durch alle Strukturperioden identisch sind. Deshalb lässt sich für den Teilchendurchgang durch mehrere Strukturperioden auch schreiben:

$$M(z + N \cdot L_p | z) = [M(z)]^N$$

Um eine stabile Teilchenbewegung entlang eines aus vielen Perioden bestehenden Kanals zu gewährleisten, müssen die Elemente der Matrix  $[M(z)]^N$  nach oben beschränkt bleiben.

Dies führt direkt zu einem Eigenwertproblem: Gesucht werden Eigenwerte  $\lambda$ , für welche der Vektor  $X_e = (x_0, x'_0)$  der Anfangskoordinaten eines beliebigen Teilchens nach einer bestimmten Anzahl von Strukturperioden in sich selbst zurückgeführt wird, d.h. für welche das Teilchen an den Ursprungsort im transversalen Phasenraum zurückkehrt (vergl. Abbildung 17). Die Eigenwerte  $\lambda$  erhält man als Lösungen der Determinantengleichung:

$$\begin{aligned} M \cdot \begin{pmatrix} x_0 \\ x'_0 \end{pmatrix} &= \lambda \cdot \begin{pmatrix} x_0 \\ x'_0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow (M - \lambda I) \cdot \begin{pmatrix} x_0 \\ x'_0 \end{pmatrix} = 0 \quad ; \\ \det(M - \lambda I) &= 0 \Leftrightarrow \begin{vmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{vmatrix} = 0 \end{aligned} \quad (2.40)$$

Da die Hill'sche Differentialgleichung (2.35) keine Terme der ersten Ableitung enthält (d.h.  $\beta_s \approx \text{const.}$ ), kann gezeigt werden (Beweis z.B. in [27]), dass gilt:

$$\det(M) = a \cdot d - b \cdot c = 1 \quad (2.41)$$

Setzt man die Bedingung (2.41) in (2.40) ein, so erhält man folgende quadratische Gleichung für die Bestimmung von  $\lambda$ :

$$\lambda^2 - \lambda(a + d) + 1 = 0 \quad (2.42)$$

Unter Verwendung des Parameters

$$\cos \sigma = \frac{1}{2}(a + d) = \frac{1}{2} \text{Sp}(M) \quad (2.43)$$

können für  $\lambda$  folgende Lösungen angegeben werden:

$$\lambda_{1,2} = \cos \sigma \pm i \cdot \sin \sigma = e^{\pm i \sigma} \quad (2.44)$$

Reelle Lösungen für  $\lambda_{1,2}$  gibt es also nur wenn:

$$|\cos \sigma| = \frac{1}{2} |\text{Sp}(M)| < 1 \Leftrightarrow 0 < \sigma < \pi \quad (2.45)$$

Es kann an dieser Stelle vorweg genommen werden, dass es sich bei dem Parameter  $\sigma$  um den transversalen Phasenvorschub handelt, wie in Gleichung (2.34) definiert. Auch die zu Beginn dieses Abschnittes qualitativ gemachte Aussage bezüglich der Stabilitätsbedingung  $0 < \sigma < \pi$  für die transversale Teilchenbewegung (vergl. Abbildung 18) findet in Gleichung (2.45) ihre Bestätigung.

Um den Parameter  $\sigma$  als den transversalen Phasenvorschub zu identifizieren, werden zunächst die „Courant-Snyder-Parameter“  $\alpha, \beta, \gamma$  wie folgt eingeführt [25]:

$$\begin{aligned} a - d &= 2\alpha \cdot \sin \sigma \quad ; \\ b &= \beta \cdot \sin \sigma \quad ; \\ c &= -\gamma \cdot \sin \sigma \quad ; \end{aligned} \quad (2.46)$$

Diese sind wegen der Bedingung (2.41)  $\det(M) = 1$  wie folgt miteinander verknüpft:

$$\beta\gamma - \alpha^2 = 1 \quad (2.47)$$

Die Gleichungen (2.46) zusammen mit (2.43) können verwendet werden, um die Elemente  $a, b, c, d$  der Transfermatrix aus Gleichung (2.38) durch die Parameter  $\alpha, \beta, \gamma$  und  $\sigma$  zu ersetzen.

Die Transfermatrix über eine Fokussierungsperiode kann somit wie folgt geschrieben werden:

$$M(z + L_p | z) = \begin{pmatrix} \cos \sigma + \alpha \cdot \sin \sigma & \beta \cdot \sin \sigma \\ -\gamma \cdot \sin \sigma & \cos \sigma - \alpha \cdot \sin \sigma \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

Wie man leicht verifizieren kann, gilt auch in dieser Darstellung  $|Sp(M)| < 2 \Rightarrow 0 < \sigma < \pi$

Für die Transformation der Einzelteilchenkoordinaten in einem periodischen Kanal kann statt der bislang verwendeten Matrixdarstellung aus Gleichung (2.38) auch die sogenannte „Phasen-Amplituden-Form“ verwendet werden.

Hierzu wird zunächst festgestellt, dass für die komplex konjugierten Lösungen  $\lambda_{1,2}$  (Gleichung (2.44)) des Eigenwertproblems gilt:  $\lambda_1 \cdot \lambda_2 = 1$

Somit gibt es zwei linear unabhängige Lösungen der Mathieu-Hill'schen Differentialgleichung, und zwar:

$$\begin{aligned} x_1(z) &= w(z) \cdot e^{+i\sigma \frac{z}{L_p}} = w(z) \cdot e^{+i\psi(z)} \quad ; \\ x_2(z) &= w^*(z) \cdot e^{-i\sigma \frac{z}{L_p}} = w^*(z) \cdot e^{-i\psi(z)} \end{aligned} \quad (2.49)$$

In der „Phasen-Amplituden-Form“ kann nun der Verlauf von  $x(z)$  als Linearkombination der beiden Lösungen angegeben werden [23]:

$$x(z) = A \cdot w(z) \cdot \cos[\psi(z) + \phi] \quad (2.50)$$

Darin sind  $A$  und  $\phi$  durch die Anfangsbedingungen (Koordinaten  $x_0(z_0), x'_0(z_0)$  jedes Einzelteilchens) bestimmte Amplituden- bzw. Phasenfaktoren.

Man kann nun zum einen die Lösungen (2.49) in die Differentialgleichung (2.35) einsetzen, um die Transfermatrix in Abhängigkeit von den Funktionen  $w(z)$  und  $\psi(z)$  auszudrücken. Eine ausführliche Herleitung bietet Referenz [23] oder [25]. Durch Vergleich der Matrixelemente mit Gleichung (2.48) ergeben sich folgende Beziehungen:

$$\begin{aligned} \psi &= \psi(z_1) - \psi(z_0) = \sigma \quad \text{mit} \quad L_p = z_1 - z_0 \quad ; \\ w^2 &= \beta \quad ; \\ w \cdot w' &= -\alpha \quad ; \\ \frac{1}{w^2} + w'^2 &= \frac{1 + \alpha^2}{\beta} = \gamma \end{aligned} \quad (2.51)$$

Zum anderen kann die Ableitung  $x'(z)$  gebildet und in die Gleichung (2.50) eingesetzt werden, um so die Größe  $(\psi + \phi)$  zu eliminieren.



Das Ergebnis (ebenfalls aus Referenz [23]) lautet:

$$\frac{x^2}{w^2} + (w \cdot x' - w' \cdot x)^2 = A^2 \quad (2.52)$$

Setzt man die Beziehungen aus Gleichung (2.51) in (2.52) ein, so erhält man den Ausdruck:

$$\gamma \cdot x^2 + 2 \cdot \alpha \cdot x x' + \beta \cdot x'^2 = A^2 = \text{const.} \quad (2.53)$$

Gleichung (2.53) ist eine Invariante der Teilchenbewegung in einem System, in welchem nur lineare Fokussierungskräfte auftreten. Sie wird auch „Courant-Snyder-Invariante“ genannt. Darüber hinaus handelt es sich um eine Ellipsengleichung, deren Größe und Orientierung von den unabhängigen Parametern  $A$ ,  $\alpha$  und  $\beta$  abhängt ( $\gamma$  ist über  $\beta\gamma - \alpha^2 = 1$  verknüpft). Der Parameter  $\alpha$  gibt die Neigung der Ellipse an. Dies erkennt man, wenn  $\alpha = 0$  in Gleichung (2.53) eingesetzt wird: Dann erhält man eine Ellipsengleichung in der Normalform (Hauptachsenlage). In diesem Fall lässt sich die Fläche der Ellipse auch sofort angeben, nämlich  $\pi \cdot A^2$ . Dieser Wert bleibt natürlich auch für  $\alpha \neq 0$  erhalten.

Auf der gemeinsamen Ellipse gemäß Gleichung (2.53) befinden sich alle Teilchen mit gleichem Parameter  $A$  aber mit unterschiedlichen  $\phi$ . Bei wachsendem Parameter  $A$  erhält man immer größere, konzentrische Ellipsen mit gemeinsamem Zentrum im Koordinatenursprung. Zum maximal vorkommenden Parameter  $A_{\max}$  gehört die äußerste Ellipse mit der größten Fläche  $\pi \cdot A_{\max}^2$ . Innerhalb dieser Fläche befinden sich also alle Teilchen des Strahls.

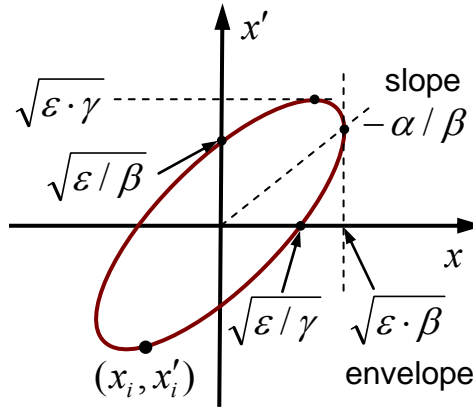
An dieser Stelle kann die Größe „Emittanz“ (in diesem Fall auch „Randemittanz“ genannt) wie folgt definiert werden:

$$\varepsilon = \frac{\text{Ellipsenfläche um alle Teilchen des Strahls}}{\pi} = \frac{\pi \cdot A_{\max}^2}{\pi} = A_{\max}^2 \quad (2.54)$$

Somit wird Gleichung (2.53) zu:

$$\gamma \cdot x^2 + 2 \cdot \alpha \cdot x x' + \beta \cdot x'^2 = \varepsilon \quad (2.55)$$

In Abbildung 19 werden die Randemittanz-Ellipse sowie die dazugehörigen Parameter  $\alpha(z)$ ,  $\beta(z)$ ,  $\gamma(z)$  veranschaulicht. Ellipsenform und –orientierung ändern sich wegen der  $z$ -Abhängigkeit der Courant-Snyder-Parameter permanent entlang der Strahlachse (vergl. Abbildung 20). Wegen der Periodizität des Kanals wird jedoch nach Durchlaufen einer vollen Strukturperiode wieder die anfängliche Ellipsenform und –orientierung erreicht. Die Emittanz bleibt, wie bereits erwähnt, als Invariante der Bewegung überall entlang  $z$  erhalten (bei linearen Fokussierungskräften).



**Abbildung 19** Randemittanz-Ellipse im  $xx'$ -Phasenraum, beschrieben durch die Gleichung  $\gamma \cdot x^2 + 2 \cdot \alpha \cdot x x' + \beta \cdot x'^2 = \varepsilon$  sowie geometrische Bedeutung der Courant-Snyder-Parameter  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ .

Die maximale Ausdehnung des Teilchenstrahls in  $x$ - bzw.  $y$ -Richtung nennt man Strahlenvelope (vergl. Abbildung 17). Die Bewegungsgleichung eines einzelnen Teilchens gemäß (2.50) kann unter Verwendung der Relationen aus Gleichung (2.51) auch folgendermaßen ausgedrückt werden:

$$x(z) = \sqrt{\varepsilon \cdot \beta(z)} \cdot \cos[\sigma(z) + \phi] \quad (2.56)$$

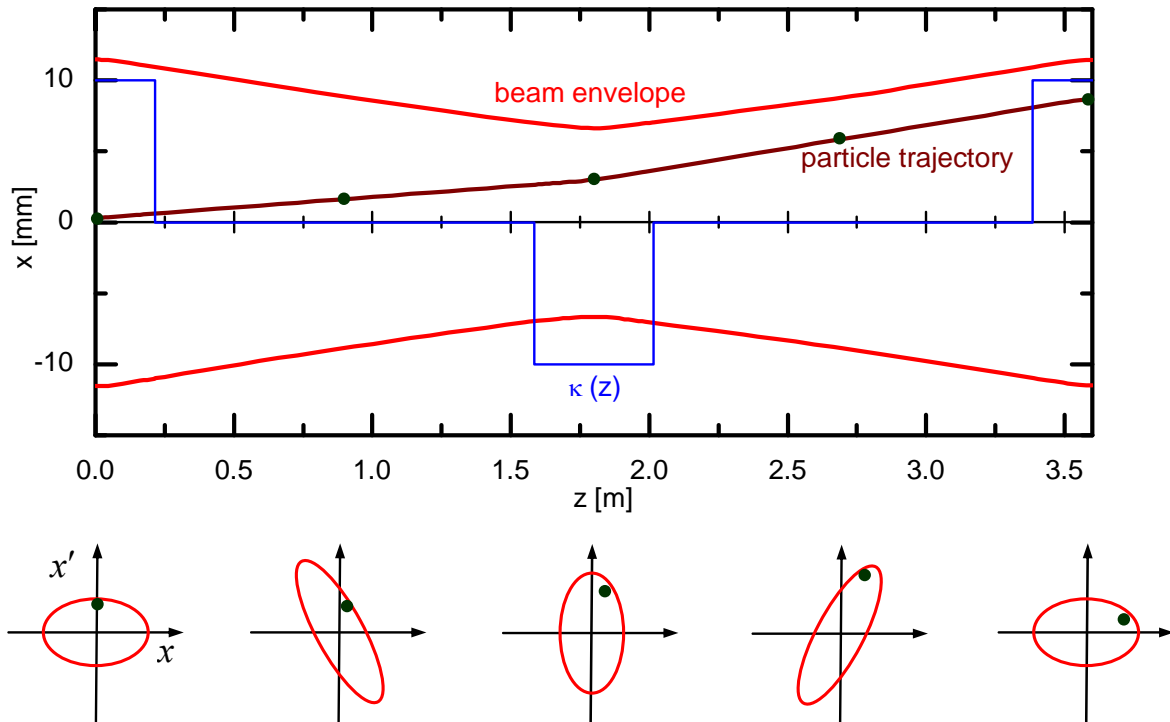
Damit ein beliebiges Teilchen an einem Ort  $z_1$  die Strahlenvelope (also den äußeren Strahlrand) berührt, muss dieses Teilchen zur Randemittanz-Ellipse gehören und außerdem muss für dieses Teilchen in Gleichung (2.56) die Bedingung  $\cos[\sigma(z_1) + \phi] = 1$  gelten.

Somit lauten die äquivalenten Beziehungen für die Strahlenvelope (Enveloppengleichung):

$$x_{env}(z) = A_{max} \cdot w(z) = A_{max} \cdot \sqrt{\beta(z)} = \sqrt{\varepsilon \cdot \beta(z)} \quad (2.57)$$

$\beta(z)$  wird als „Betatron-Funktion“ bezeichnet und hat die gleiche Periode  $L_p$  wie die Fokussierungsstärke  $\kappa(z)$  entlang des periodischen Kanals, wenn der Strahl „angepasst“ ist (vergl. Abbildung 17). Ein Strahl wird als angepasst bezeichnet, wenn die Randemittanz-Ellipse nach Durchlaufen einer Strukturperiode identisch ist mit der Ellipse zu Beginn der Periode.

In Abbildung 20 wird der Zusammenhang zwischen Strahlenvelope, Einzelteilchenbewegung und dem Verlauf der Randemittanz-Ellipse entlang einer Strukturperiode für das Beispiel aus Abbildung 17 mit  $\sigma = 60^\circ$  veranschaulicht:



**Abbildung 20** Teilchentransport entlang einer F0D0-Strukturperiode bei  $\sigma = 60^\circ$ .

In jedem Beschleuniger ist die transversale Enveloppenoszillation durch den lokalen Strahlrohrradius („Aperturradius“)  $r_{apert}$  begrenzt, d.h. beim Berühren der Apertur geht ein Teil des Strahls verloren. Die maximal erlaubte Ausdehnung der Envelope ist demnach:

$$x_{env,max} = r_{apert} = \sqrt{\varepsilon_a \cdot \beta_{max}} \quad (2.58)$$

Man bezeichnet die Größe  $\varepsilon_a = r_{apert}^2 / \beta_{max}$  als transversale „Akzeptanz“ des Beschleunigers.

Die bisherigen Ergebnisse bezüglich der Stabilität der transversalen Teilchenbewegung im periodisch fokussierenden Quadrupolkanal können wie folgt zusammengefasst werden:

- Es konnte eine Lösung der Hill'schen Differentialgleichung in Matrixform (2.37) angegeben werden. Die Gesamtmatrix über eine Strukturperiode ergibt sich dabei aus der Matrixmultiplikation aller darin enthaltenden Fokussierungselemente.
- Aus der Darstellung der Gesamtübertragungsmatrix in der Form von Gleichung (2.48) lassen sich der transversale Phasenvorschub  $\sigma$  sowie die Courant-Snyder-Parameter  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  ermitteln.
- Der transversale Phasenvorschub  $\sigma$  ist im Wesentlichen durch die Fokussierungsstärke  $\kappa(z)$  der Quadrupollinsen bestimmt und muss die Stabilitätsbedingung  $\sigma < \pi$  erfüllen.
- Die Courant-Snyder-Parameter  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  definieren zusammen mit der Emittanz  $\varepsilon$  die für einen angepassten Strahltransport notwendigen Bedingungen an den Teilchenstrahl. Dies ist der Fall, wenn sich zu Beginn einer Strukturperiode die Projektion aller Teilchenkoordinaten auf die transversalen Ebenen  $(x, x')$  bzw.  $(y, y')$  innerhalb der durch  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  und  $\varepsilon$  definierten Ellipsenfläche befindet (vergl. Abbildung 19).
- Anders als bei der Teilchenbewegung im longitudinalen Phasenraum stellt unabhängig von den sonstigen Parametern der Fokussierungselemente die vorhandene Apertur des Strahlrohrs entlang  $z$  eine weitere Randbedingung der Bewegung dar (Gl. (2.58)).

### Transversale Strahldynamik unter Berücksichtigung der HF-Defokussierung in den Beschleunigungsspalten

Der bislang innerhalb dieses Abschnitts entwickelte Formalismus hat auch bei Berücksichtigung der HF-Defokussierung in den Beschleunigungsspalten weiterhin Gültigkeit. Es muss lediglich ein entsprechender Ausdruck für die transversale Ablenkung im Spalt gefunden und entsprechend in die Hill'sche Differentialgleichung integriert werden.

Wie im Abschnitt 2.3.1 erläutert, überwiegt bei ansteigendem HF-Feld der defokussierende Anteil von  $E_r$  in der zweiten Spalthälfte, was zu einer Netto-Defokussierung führt. Dieser Effekt wird in Abbildung 21 schematisch dargestellt und soll nun quantitativ untersucht werden.

Wegen der Radialsymmetrie der Felder im Beschleunigungsspalt können zylindrische Koordinaten verwendet werden. Die Impulsänderung in radialer Richtung ergibt sich aus dem radialen Anteil der Lorentzkraft  $\vec{F}_L = q \cdot (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$  wie folgt:

$$\frac{d}{dt} p_r = F_r = \gamma m \ddot{r} = q(E_r - v_z B_\varphi) = q(E_r - \beta c B_\varphi) \quad (2.59)$$

$E_r$  und  $B_\varphi$  lassen sich jeweils zu  $E_z$  in Beziehung setzen, und zwar:

$$\text{aus } \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0 \Rightarrow E_r = -\frac{\partial E_z}{\partial z} \cdot \frac{r}{2}$$

$$\text{aus } (\vec{\nabla} \times \vec{B})_r = \frac{1}{c^2} \frac{\partial E_r}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial B_\varphi}{\partial z} = -\frac{1}{c^2} \cdot \frac{\partial E_r}{\partial t} = \frac{r}{2c^2} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \cdot \frac{\partial E_z}{\partial t}$$

$$\text{sowie nach Integration über } z: \quad B_\varphi = \frac{r}{2c^2} \cdot \frac{\partial E_z}{\partial t}$$

Unter Verwendung dieser Beziehungen lässt sich Gleichung (2.59) folgendermaßen schreiben:

$$\frac{d}{dt} p_r = F_r = \gamma m \ddot{r} = q(E_r - \beta c B_\varphi) = -q \frac{r}{2} \left( \frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{\beta}{c} \cdot \frac{\partial E_z}{\partial t} \right) \quad (2.60)$$

Im nächsten Schritt werden die partiellen Ableitungen  $\partial E_z / \partial z$  und  $\partial E_z / \partial t$  durch folgenden Ausdruck ersetzt:

$$\frac{d}{dz} E_z(z, t) \equiv \frac{dE_z}{dz} = \frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{\partial E_z}{\partial t} \cdot \frac{\partial t}{\partial z} = \frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{1}{\beta c} \cdot \frac{\partial E_z}{\partial t} \quad (2.61)$$

Dies ist unter der Annahme zulässig, dass sich die Stehwellenlösung des Spaltfeldes mit einem Produktansatz in eine orts- und eine zeitabhängige Komponente zerlegen lässt:

$$E_z(z, t) = E_z(z) \cdot E_z(t) = E_z(z) \cdot \cos(\omega t + \varphi_s) \quad (2.62)$$

Damit lässt sich Gleichung (2.60) wie folgt schreiben:

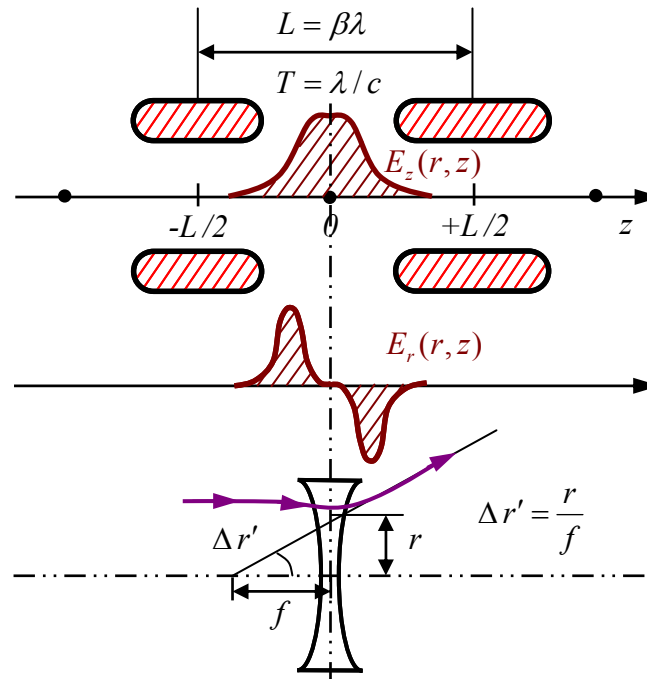
$$\frac{d}{dt} p_r = F_r = \gamma m \ddot{r} = -q \frac{r}{2} \left( \frac{dE_z}{dz} - \left( \frac{1}{\beta c} - \frac{\beta}{c} \right) \cdot \frac{\partial E_z}{\partial t} \right) \quad (2.63)$$

Die integrale Änderung des radialen Impulses beim Durchgang durch den Beschleunigungsspalt kann wie folgt definiert werden:

$$\Delta p_r \equiv \gamma m \cdot \Delta r' \cdot \beta c \quad (2.64)$$

Dabei ist  $\Delta r'$  die gesamte Änderung des radialen Phasenraumwinkels eines beliebigen Teilchens durch die HF-Defokussierung und der Strich symbolisiert die Umwandlung der Zeitableitung in eine äquivalente Ortsableitung:

$$\dot{r} = \frac{dr}{dz} \cdot \frac{dz}{dt} = r' \cdot \beta c$$



**Abbildung 21** HF-Defokussierung im Beschleunigungsspalt bei Betrieb mit negativer Sollphase.

Man erhält  $\Delta p_r$  aus Gleichung (2.63) durch Integration über die gesamte effektive Spaltlänge von  $-L/2$  bis  $+L/2$  (zum Vergleich Abbildung 21):

$$\Delta p_r = \gamma m \dot{r} = -q \frac{r}{2} \int_{-L/2}^{+L/2} \left( \frac{dE_z}{dz} - \left( \frac{1}{\beta c} - \frac{\beta}{c} \right) \cdot \frac{\partial E_z}{\partial t} \right) dt = -q \frac{r}{2} \int_{-L/2}^{+L/2} \left( \frac{dE_z}{dz} - \left( \frac{1}{\beta c} - \frac{\beta}{c} \right) \cdot \frac{\partial E_z}{\partial t} \right) \frac{dz}{\beta c}$$

Die Integration über die totale Ortsableitung  $dE_z/dz$  ist wegen der Symmetrie des elektrischen Feldes im Spalt gleich null. Somit verbleibt für  $\Delta p_r$  der Ausdruck:

$$\Delta p_r = -\frac{qr}{2\beta^2 c^2} \int_{-L/2}^{+L/2} (1 - \beta^2) \frac{\partial E_z}{\partial t} dz = -\frac{qr}{2\beta^2 c^2 \gamma^2} \int_{-L/2}^{+L/2} \frac{\partial E_z}{\partial t} dz \quad (2.65)$$

Die Zeitableitung  $\partial E_z / \partial t$  ergibt sich aus Gleichung (2.62):

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = -\omega \cdot E_z(z) \cdot \sin(\omega t + \varphi_s)$$

Mit der Identität  $\sin(\omega t + \varphi_s) = \sin(\omega t) \cdot \cos(\varphi_s) + \cos(\omega t) \cdot \sin(\varphi_s)$  sowie wegen  $\sin(\omega t) = 0$  (bei  $t = 0$  in der Spaltmitte), erhält man schließlich aus Gleichung (2.65):

$$\Delta p_r = -\frac{qr\omega}{2\beta^2 c^2 \gamma^2} \cdot \sin(\varphi_s) \cdot \int_{-L/2}^{+L/2} E_z(z) \cdot \cos(\omega t) dz = -\frac{qr\omega}{2\beta^2 c^2 \gamma^2} \cdot \sin(\varphi_s) \cdot U_0 \cdot T \quad (2.66)$$

Dabei ist  $U_0$  die Spaltspannungs-Amplitude und  $T$  der Transit-Time-Faktor, wie in Gleichung (2.8) definiert.

Mit der Definition aus Gleichung (2.64) sowie dem Ergebnis aus Gleichung (2.66) lässt sich abschließend folgender Ausdruck für den Effekt der radialen Defokussierung in einem Beschleunigungsspalt angeben:

$$\Delta p_r = \gamma m \cdot \Delta r' \cdot \beta c = -\frac{\pi q r}{\gamma^2 \beta^2 c \lambda} \cdot \sin(\varphi_s) \cdot U_0 \cdot T \quad (2.67)$$

Aus Gleichung (2.67) lässt sich durch Umformen ein Ausdruck für die Größe  $\Delta r' / r$  gewinnen. Aus Abbildung 21 sieht man, dass  $\Delta r' / r$  der Kehrwert der Brennweite  $f$  ist:

$$\frac{1}{f} = \frac{\Delta r'}{r} = -\frac{\pi \cdot q \cdot U_0 \cdot T \cdot \sin(\varphi_s)}{m \cdot \gamma^3 \cdot \beta^3 \cdot c^2 \cdot \lambda} \quad (2.68)$$

Die Wirkungsweise des Beschleunigungsspalts bei negativer Sollphase ist also die einer dünnen, defokussierenden Linse mit der Brennweite  $f$ , gemäß Gleichung (2.68).

In der Matrixschreibweise lässt sich die Wirkung der HF-Defokussierung daher wie folgt angeben:

$$\begin{pmatrix} x \\ x' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{\pi \cdot q \cdot U_0 \cdot T \cdot \sin(\varphi_s)}{m \cdot \gamma^3 \cdot \beta^3 \cdot c^2 \cdot \lambda} & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_0 \\ x'_0 \end{pmatrix} \quad (2.69)$$

Bei  $\varphi_s = 0^\circ$  findet keine HF-Defokussierung statt, bei  $\varphi_s = -90^\circ$  ist der Effekt dagegen maximal, wie bereits qualitativ beschrieben. Außerdem nimmt der Effekt mit zunehmender Teilchengeschwindigkeit stark ab (und zwar mit  $f \sim \gamma^3 \cdot \beta^3$ ). Daher ist bei Linearbeschleunigern, welche typischerweise durchgehend mit der Sollphase  $\varphi_s = -30^\circ$  betrieben werden, eine hohe Dichte der fokussierenden Elemente erforderlich, insbesondere bei niedrigen Teilchenenergien. In der Regel wird in jeder Beschleunigerzelle

(Driftröhrengehäuse zwischen zwei aufeinander folgenden Spalten) eine Quadrupollinse integriert, um die HF-Defokussierung zu kompensieren.

Ein wesentlicher Vorteil der am Institut für Angewandte Physik entwickelten KONUS-Strahldynamik (vergl. Kapitel 3) besteht darin, dass mehrzellige Beschleunigerabschnitte zulässig sind, welche mit  $\varphi_s = 0^\circ$  betrieben werden können, sodass die HF-Defokussierung und somit auch die Linsendichte insgesamt wesentlich kleiner ist.

Um Stabilitätsbedingungen für die transversale Teilchenbewegung in Driftröhren-Linearbeschleunigern unter Berücksichtigung der HF-Defokussierung zu untersuchen, muss lediglich der in diesem Abschnitt entwickelte Formalismus um das Matrixelement „HF-Spalt“ gemäß Gleichung (2.69) erweitert werden.

Eine typische FODO-Strukturperiode mit Quadrupollinsen und HF-Spalten wird in Abbildung 22 dargestellt. Anfang- und Endpunkt der Periode wurden in die Mitten der fokussierenden Linsen gesetzt.

Die Gesamttransfermatrix über eine solche Periode lautet (zum Vergleich Gleichung (2.39)):

$$M_{F0D0} = M_{F/2} \times M_0 \times M_G \times M_0 \times M_D \times M_0 \times M_G \times M_0 \times M_{F/2} \quad (2.70)$$

Dabei ist:

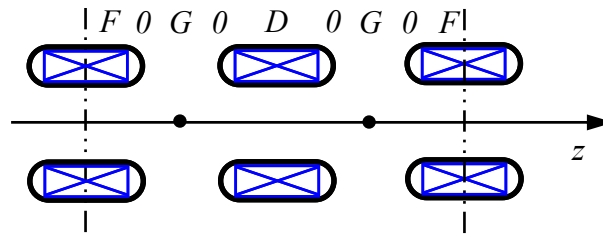
$M_{F/2}$  = Transfermatrix eines fokussierenden Quadrupols (halbe Länge) gemäß Gleichung (2.26).

$M_D$  = Transfermatrix eines defokussierenden Quadrupols gemäß Gleichung (2.27).

$M_0$  = Transfermatrix einer Driftstrecke.

$M_G$  = Transfermatrix für die HF-Defokussierung im Beschleunigungsspalt gemäß Gleichung (2.69).

Bei gegebenen Linsenstärken sowie Spaltspannungsamplituden und –sollphasen können mit Hilfe von Gleichung (2.70) und durch Koeffizientenvergleich mit Gleichung (2.48) der resultierende transversale Phasenvorschub  $\sigma$  sowie die Courant-Snyder-Parameter  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  des betreffenden FODO-Kanals angegeben werden



**Abbildung 22 FODO-Strukturperiode mit Quadrupollinsen und Beschleunigungsspalten.**

## 2.4. Strahlparameter im 6-dimensionalen Phasenraum

Im Laufe der bisherigen Ausführungen wurden bereits Begriffe wie „longitudinaler“ und „transversaler Phasenraum“, „Randemittanz-Ellipse“ (vergl. Gleichung (2.54)) verwendet bzw. eingeführt.

Zum Abschluss des Kapitels 2 zur Einführung in die Strahldynamik-Prinzipien für Linearbeschleuniger wird in einer systematischen Form auf die in der Beschleunigerphysik verwendeten Größen und Begriffe zur Charakterisierung von Teilchenstrahlen eingegangen, sofern diese für die vorliegende Arbeit relevant sind.

Als „Strahl“ bezeichnet man alle Teilchen, die eine geringe radiale Abweichung  $\Delta r$  von einer definierten Sollbahn (Parameter „s“, meist identisch mit der longitudinalen Achse  $z$ ) sowie einen geringen radialen Divergenzwinkel  $\Delta r'$  besitzen.

In Hochfrequenz-Driftröhrenbeschleunigern hat man es meist mit einem longitudinal „gebündelten“ Strahl zu tun („gebunchter“ Strahl = „Bunch“), bei welchem also auch die Abweichungen  $\Delta z$  und  $\Delta z'$  in Bewegungsrichtung des Strahls klein sind.

Jedes von  $N$  Strahlteilchen wird an jedem Ort  $s$  entlang der Sollbahn vollständig durch seine drei Ortskoordinaten  $x, y, z$  und die drei Impulsbeiträge  $p_x, p_y, p_z$  vollständig beschrieben. Dabei werden die sechs genannten Koordinaten relativ zu einem gedachten „Sollteilchen“ (Index „s“) betrachtet. Dieses hat nach dieser Definition keine Ortsablage  $x, y, z$  in Bezug auf die Sollbahn und auch keine Impulsabweichung  $p_x, p_y, p_z$  bezogen auf sich selbst.

In der „paraxialen Näherung“ (d.h. die Teilchen sind hinreichend nahe der Sollbahn und ihre radialen Impulse sind viel kleiner als ihr longitudinaler Impuls in Bewegungsrichtung des Strahls), können statt der transversalen Impulse  $p_x, p_y$  auch die Divergenzwinkel  $x', y'$  zwischen der tatsächlichen und der Sollbahn (in *rad* oder *mrad*) verwendet werden:

$$x' = \frac{\Delta x}{\Delta z} = \frac{\beta_x}{\beta_z} \quad ; \quad y' = \frac{\Delta y}{\Delta z} = \frac{\beta_y}{\beta_z}$$

Für die longitudinale Ebene ist es zweckmäßig, statt  $(z, z')$  die Koordinaten  $(\Delta\varphi, \Delta W)$  in den Einheiten [ns] oder [deg] sowie [MeV] zu verwenden, wie bereits aus Abschnitt 2.2 bekannt.

Die sechs unabhängigen Koordinaten  $(x, x', y, y', z, z')$  eines beliebigen Teilchens können als Punkt in einem 6-dimensionalen Raum, dem sogenannten „Phasenraum“, interpretiert werden. Da sich die Teilchen des Strahls im Allgemeinen in ihren Koordinaten unterscheiden, nimmt das Ensemble aus  $N$  Teilchen ein bestimmtes, endliches Phasenraumvolumen im 6-dimensionalen Phasenraum ein.

Somit kann die Zusammensetzung bzw. die „Qualität“ eines Strahls mit Hilfe seiner Dichteverteilungsfunktion  $f = f(x, x', y, y', z, z' ; s)$  im 6-dimensionalen Phasenraum an jedem Ort  $s$  entlang der Sollbahn beschrieben werden.

Die Dichtefunktion  $f$  kann durchaus als Wahrscheinlichkeitsdichte im statistischen Sinne interpretiert werden, nämlich als Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen am Ort  $s$  entlang der Sollbahn in einem infinitesimalen Phasenraumvolumen mit der Kantenlänge  $V_6 = dx \cdot dx' \cdot dy \cdot dy' \cdot dz \cdot dz'$  vorzufinden.

Nach dieser Definition beträgt die Gesamtwahrscheinlichkeit für alle  $N$  Teilchen:

$$N = \iiint \iiint f(x, x', y, y', z, z' ; s) dx dx' dy dy' dz dz' \quad (2.71)$$

## Das Liouville'sche Theorem

Das Liouville'sche Theorem besagt, dass die Phasenraumdichte  $f = f(x, x', y, y', z, z' ; s)$  entlang der Sollbahn konstant bleibt, d.h.:

$$\frac{d}{ds} f(x(s), x'(s), y(s), y'(s), z(s), z'(s) ; s) = 0 \quad (2.72)$$

Ein Teilchenensemble verhält sich also im 6-dimensionalen Phasenraum wie eine inkompressible Flüssigkeit. Das Liouville'sche Theorem gilt allerdings nur für Hamilton-Systeme, d.h. nur dann, wenn sich die Bewegungsgleichungen von einer Hamiltonfunktion

ableiten lassen. Das Liouville'sche Theorem gilt zum Beispiel nicht für dissipative Systeme, d.h. wenn Stoßvorgänge zwischen einzelnen Teilchen eine Rolle spielen, oder wenn Teilchen verloren gehen. Dagegen sind nichtlineare Kräfte zugelassen.

In einem realen Teilchenstrahl eines Beschleunigers ist die Teilchendichte in der Regel so, dass man zwar meistens die Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung in der Simulation berücksichtigen muss, jedoch können direkte Kollisionen zwischen Teilchenpaaren vernachlässigt werden. Man behandelt deshalb die Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung („Raumladungskraft“) in der Simulation als kollektiven Effekt, d.h. man mittelt über die Beiträge aller Teilchen im Strahl und definiert gegebenenfalls ein „Cut-Off-Radius“, um Streuung an einzelnen Teilchen zu vermeiden.

Somit kann davon ausgegangen werden, dass bei den Strahldynamik-Simulationen unter Verwendung der in der vorliegenden Arbeit entwickelten Werkzeuge der Liouville'sche Satz gilt, sofern es zu keinen Teilchenverlusten kommt.

## Die ersten und zweiten Momente einer Teilchenverteilung

Jede Verteilungsfunktion  $f = f(x, x', y, y', z, z'; s)$  wird durch die Gesamtheit ihrer Momente charakterisiert. Dies sind die Mittelwerte  $\bar{g}$  beliebiger Funktionen  $g(x, x', y, y', z, z')$ , welche sich wie folgt berechnen lassen:

$$\bar{g} = \frac{1}{N} \iiint \iiint g(x, x', y, y', z, z') \cdot f(x, x', y, y', z, z'; s) dx dx' dy dy' dz dz' \quad (2.73)$$

Die ersten Momente der Dichteverteilungsfunktion  $f = f(x, x', y, y', z, z'; s)$  sind die Mittelwerte bezüglich jeder Koordinate, d.h.  $\bar{x}, \bar{x'}, \bar{y}, \bar{y'}, \bar{z}, \bar{z'}$ . Diese beschreiben die Position des Strahlschwerpunktes in allen 6 Koordinaten und lassen sich mit Gleichung (2.73) bestimmen, so zum Beispiel  $\bar{x}$ :

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \iiint \iiint x \cdot f(x, x', y, y', z, z'; s) dx dx' dy dy' dz dz'$$

Die Bestimmung der Strahlschwerpunkte aus der Verteilungsfunktion  $f$  entlang der Sollbahn  $s$  ist ein sehr nützliches Mittel, um zum Beispiel Schwankungen aufgrund von Fehlanpassung, Steering, Maschinenfehlern usw. zu beobachten.

Die zweiten Momente der Dichteverteilungsfunktion  $f = f(x, x', y, y', z, z'; s)$  sind die Mittelwerte bezüglich aller Kombinationen der Teilchenkoordinaten in allen 6 Dimensionen, d.h. zum Beispiel  $\overline{x^2}, \overline{xx'}, \overline{xy}, \overline{xy'}, \overline{x'y}, \overline{x'^2}$  usw.

Ein besonderes Augenmerk gilt folgenden Größen:

$$\tilde{x} \equiv \sqrt{\overline{x^2}} \quad , \quad \tilde{y} \equiv \sqrt{\overline{y^2}} \quad , \quad \tilde{z} \equiv \sqrt{\overline{z^2}} \quad (2.74)$$

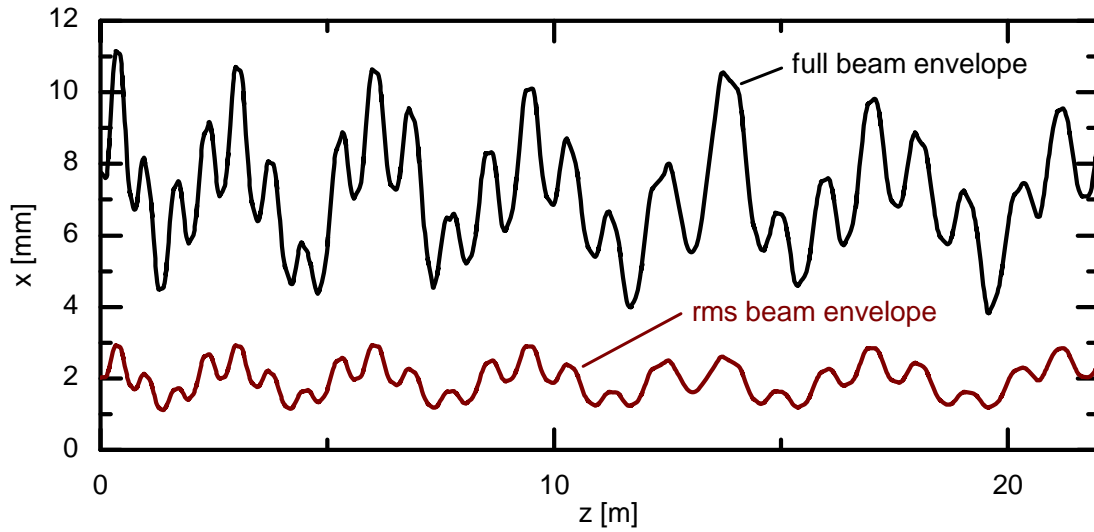
Diese heißen RMS-Radien bzw. RMS-Enveloppen des Strahls (rms = „root mean square“, quadratisches Mittel). Sie sind besonders als Maß geeignet, die Oszillationen des Kernbereiches (= „Core“) eines Strahls darzustellen und dabei die durch Randteilchen verursachten Fluktuationen der Strahlrandenvelope herauszufiltern. Allerdings beträgt die RMS-Envelope im Allgemeinen nur einen Bruchteil der gesamten Strahlenvelope, wie im Beispiel von Abbildung 23 gezeigt.

Die Definitionen aus Gleichung (2.74) gelten eigentlich nur für achsenzentrierte Strahlen. Die allgemeinere Definition für nicht achsenzentrierte Strahlen lautet:

$$\sigma_x \equiv \sqrt{\overline{(x - \bar{x})^2}} = \sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2}, \quad \sigma_y, \sigma_z \text{ entsprechend} \quad (2.75)$$



und bezeichnet die Standardabweichung der Dichteverteilung  $f$  in der jeweiligen Koordinate.



**Abbildung 23** Vergleich zwischen der RMS-Envelope nach Gleichung (2.74) bzw. (2.75) und der (Rand)Envelope eines Strahls.

Um einen optischen Eindruck von der Verteilung der Teilchen eines Strahls im Phasenraum zu bekommen, werden die 2-dimensionalen Projektionen auf die Ebenen  $(x, x')$ ,  $(y, y')$  und  $(z, z')$  bzw.  $(\Delta\varphi, \Delta W)$  verwendet.

Unter der Voraussetzung linearer Fokussierungskräfte bewegt sich jedes einzelne Teilchen auf Ellipsenbahnen in den 2-dimensionalen Unterebenen des Phasenraums, wie bereits im Abschnitt 2.3.4 erläutert wurde (vergl. Gleichung (2.55) und Abbildung 19).

Für einen angepassten Strahl bilden die Pfade mit gleicher Teilchendichte ebenfalls konzentrische Ellipsen. Deshalb hat die gesamte Verteilung in jeder 2-dimensionalen Projektion des Phasenraumes eine ellipsenförmige Umrandung, deren Fläche /  $\pi$  man (Rand)Emittanz nennt, wie in Gleichung (2.54) bzw. (2.55) bereits eingeführt.

## Die RMS-Emittanz

Sind nichtlineare Kraftkomponenten vorhanden (sowohl von den Eigenfeldern des Strahls als auch nichtlineare äußere Kräfte der Fokussierungs- und Beschleunigungselemente), so können die 2-dimensionalen Projektionen der Teilchenverteilung im Phasenraum beliebige Flächen belegen, zum Beispiel auch ohne wohldefinierte Umrandung.

Da in diesem Fall keine Randemittanz-Ellipse mehr angegeben werden kann, wurde von Sacherer [28] und Lapostolle [29] die „RMS-Emittanz“ eingeführt, eine Größe, die durch die zweiten Momente der Teilchenverteilung charakterisiert ist und wie folgt definiert wird:

$$\varepsilon_{rms} \equiv \sqrt{\overline{x^2 \cdot x'^2} - (\overline{x \cdot x'})^2} \quad (2.76)$$

Die einzelnen Terme in Gleichung (2.76) können zu den Courant-Snyder-Parametern  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  wie folgt in Beziehung gesetzt werden:

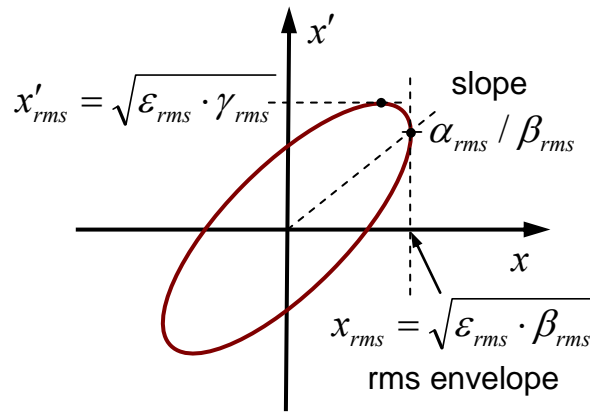
$$\begin{aligned} \sqrt{\beta_{rms} \cdot \varepsilon_{rms}} &\equiv \overline{x^2} = x_{rms}^2 \\ \sqrt{\gamma_{rms} \cdot \varepsilon_{rms}} &\equiv \overline{x'^2} = x'_{rms}{}^2 \\ \alpha_{rms} \cdot \varepsilon_{rms} &\equiv -(\overline{x \cdot x'}) \end{aligned} \quad (2.77)$$

Die ersten beiden Beziehungen aus den Gleichungen (2.77) folgen in Analogie zur Definition der Strahlenvelope gemäß Gleichung (2.58), der Ausdruck für  $\alpha_{rms} \cdot \varepsilon_{rms}$  ergibt sich dann durch Einsetzen von  $x_{rms}$  und  $x'_{rms}$  in Gleichung (2.76) und aus der Bedingung  $\beta\gamma - \alpha^2 = 1$ .

Durch die auf diese Weise gewonnenen Courant-Snyder-Parameter  $\alpha_{rms}, \beta_{rms}, \gamma_{rms}$  kann analog zur Definition der Randemittanz-Ellipse (vergl. Gleichung (2.55) und Abbildung 19) eine RMS-Phasenraumellipse definiert werden:

$$\gamma_{rms} \cdot x^2 + 2 \cdot \alpha_{rms} \cdot xx' + \beta_{rms} \cdot x'^2 = \varepsilon_{rms} \quad (2.78)$$

Diese ist im Falle von unregelmäßigen Phasenraumkonturen besser zur Charakterisierung der Teilchenverteilung geeignet als die Randemittanz, da sie in Größe und Lage durch die zweiten Momente der Verteilung definiert wird.



**Abbildung 24** RMS-Phasenraumellipse sowie geometrische Bedeutung der Courant-Snyder-Parameter  $\alpha_{rms}, \beta_{rms}, \gamma_{rms}$ .

### Normierte Emittanzen

Die unnormierte Emittanz (sowohl Rand- wie auch RMS-Emittanz) steht in direktem Zusammenhang mit der Fläche, die die Teilchenverteilung bzw. die RMS-Ellipse im Phasenraum einnimmt, nämlich als Produkt der Halbachsen der jeweiligen Ellipse.

So sind zum Beispiel die unnormierten Emittanzen bei Hauptachsenlage der Ellipsen durch folgende Ausdrücke gegeben:

$$\varepsilon_x = \Delta x_{\max} \cdot \Delta x'_{\max} \quad ; \quad \varepsilon_{rms,x} = x_{rms} \cdot x'_{rms}$$

Diese Größen werden entlang eines Beschleunigers immer kleiner, da  $\beta_x \approx const.$ , während  $\beta_z$  aufgrund der Teilchenbeschleunigung anwächst, so dass  $x'$  immer kleiner wird.

Um diesen Effekt zu berücksichtigen, wird anstelle der Winkeldivergenz  $x'$  die dimensionslose Variable  $\Delta p_x / mc$  verwendet, womit sich die normierte Emittanz wie folgt berechnen lässt:

$$\varepsilon_{rms,x} = \Delta x \cdot \Delta p_x / mc = \Delta x \cdot \Delta x' \cdot p_z / mc = \Delta x \cdot \Delta x' \cdot \beta \cdot \gamma \quad (2.79)$$

### 3. Das KONUS-Strahldynamikkonzept und das Simulationsprogramm LORASR

#### 3.1. „Kombinierte Null Grad Struktur“ KONUS

Im Kapitel 2.1 wurden bereits die Vorteile von H-Mode Resonatoren gegenüber der Alvarez-Struktur erläutert. Diese sind insbesondere:

- Höhere Shuntimpedanzen (vergl. Gleichung (2.5) und Abbildung 5) aufgrund geringerer HF-Wandverluste bei H-Moden.
- Verbesserte Hochspannungs-Durchschlagsfestigkeit bei Verwendung dünnwandiger Driftröhren und damit verbunden höhere mittlere Beschleunigungsgradienten.
- Zu den hohen Beschleunigungsgradienten trägt auch die höhere Anzahl von Beschleunigungsspalten pro Resonatorlänge bei, da man für  $\beta\lambda/2$ -Strukturen mit dünnwandigen Driftröhren ein typisches Verhältnis von Spatlänge zu Periodenlänge  $g/L \cong 0.5$  wählen kann (bei Alvarez-Strukturen mit dickwandigen Driftröhren und integrierten Quadrupolen ist dagegen  $g/L \cong 0.25$ ).

Um diese Vorteile optimal ausnutzen zu können, wurde ein Strahldynamikkonzept entwickelt, welches die radial defokussierenden Kräfte minimiert und zugleich eine ausreichende Fokussierung und eine stabile Teilchenbewegung im longitudinalen Phasenraum gewährleistet. Dieses trägt den Namen „Kombinierte Null Grad Struktur“ – KONUS [17].

Anders als bei dem in Kapitel 2 vorgestellten konventionellen Ansatz mit durchgehend negativer Sollphase in den Beschleunigungsspalten und einem Quadrupolkanal (F0D0) für die transversale Fokussierung, werden beim KONUS-Konzept Beschleunigung sowie longitudinale und transversale Fokussierung räumlich voneinander getrennt.

Eine KONUS-Periode besteht aus folgenden Komponenten:

- Eine Hauptbeschleunigungsstrecke aus 10-20 Spalten bei  $\varphi_s = 0^\circ$ , ohne Elemente zur transversalen Fokussierung.
- Ein leistungsstarkes, transversal fokussierendes Element – meistens ein magnetisches Quadrupoltriplett, seit neuestem auch supraleitende Solenoidlinsen.
- Ein Abschnitt zur longitudinalen Fokussierung bestehend aus 3-7 Spalten bei  $\varphi_s = -35^\circ$ , analog zur konventionellen negativen Sollphasenstruktur.

Die drei obengenannten Abschnitte einer KONUS-Periode können bei niedrigen Teilchenenergien in einem gemeinsamen Resonator untergebracht werden. Dann werden die Quadrupole meist als interne Linsen ausgeführt, deren Gehäuse die Resonanzmode der Kavität beeinflusst. Mehrere KONUS-Perioden können im Resonatortank aufeinander folgen. Kavitäten mit bis zu drei internen Triplettlinsen wurden bereits realisiert ([6], vergl. Abbildung 3). Bei höheren Teilchenenergien besteht der Resonator nur aus Driftröhrensektionen und die Linsen befinden sich im Zwischentankbereich.

Mehrere Tanks mit dazwischengelagerten Linsen, Strahlanpassungsstrecken, Diagnoseelementen usw. können so zu einer langen periodischen Kette von Resonatoren zusammengefasst werden. Auch Frequenzsprünge oder der Wechsel von der IH- zur CH-Struktur als Beschleunigereinheit sind zulässig.

Nachfolgend wird auf die einzelnen Abschnitte einer KONUS-Periode und deren Zusammenwirken zur Sicherstellung einer stabilen Teilchenbewegung im Phasenraum näher eingegangen.

### 3.1.1. Strukturperiode der longitudinalen Bewegung: KONUS

Eine ausführliche Beschreibung der Teilchenbewegung in einer „Kombinierte Null Grad Struktur“ (KONUS) findet man in Referenz [17]. Dort wird die Abkürzung KONUS auch erstmals verwendet. In der vorliegenden Arbeit werden deshalb lediglich die Grundprinzipien der KONUS-Strahldynamik qualitativ beschrieben.

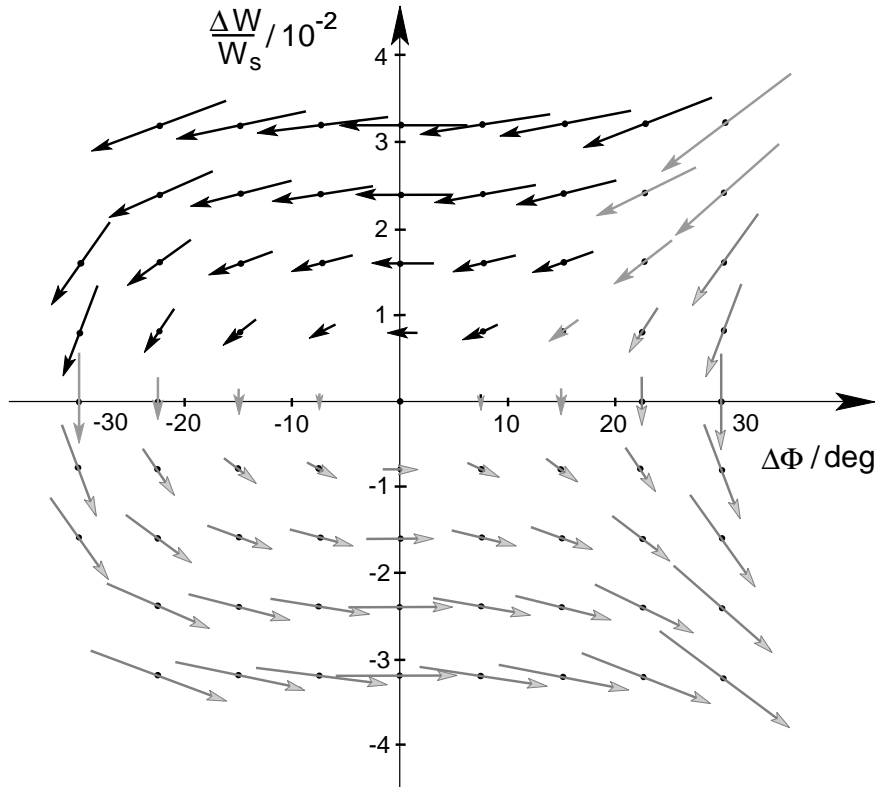
Kernstück einer KONUS-Periode ist der Abschnitt mit  $\varphi_s = 0^\circ$ . Wie in Kapitel 2.2 bereits beschrieben (vergl. Abbildung 10), ist für  $\varphi_s = 0^\circ$  keine stabile Bewegung im longitudinalen Phasenraum möglich. Dabei wird jedoch vorausgesetzt, dass der Schwerpunkt der Teilchenverteilung (Index „cp“) und das Sollteilchen (Index „s“) identisch sind.

Bei KONUS wird diese Einschränkung aufgehoben. Der Strahl wird asynchron, d.h. mit Überschussenergie und einer beliebigen Phasenablage in Bezug auf das Sollteilchen in die  $0^\circ$ -Sektion eingeschossen:

$$\Delta W = W_{cp} - W_s > 0 \quad ; \quad \Delta\varphi = \varphi_{cp} - \varphi_s = \varphi_{cp} \neq 0$$

In Abbildung 25 wird nunmehr nicht nur die Bewegung eines jeden Einzelteilchens um das  $0^\circ$ -Sollteilchen, sondern auch die des Schwerpunktes einer Teilchenverteilung (Koordinaten  $\Delta\varphi(i), \Delta W(i)$ ) durch eine mehrzellige Struktur mit Spaltindex  $i$  dargestellt. Man erkennt, dass eine stabile Teilchenbewegung im longitudinalen Phasenraum bei asynchronem Einschuss gewährleistet ist, sofern man typisch eine viertel Phasenoszillation des Schwerpunktteilchens um das gedachte Sollteilchen zulässt. Dies ist je nach absoluter Energie des Strahls und gewählten Anfangskoordinaten  $\Delta\varphi(1), \Delta W(1)$  typischerweise für bis zu 10-20 aufeinanderfolgende Spalte der Fall. Danach muss die  $0^\circ$ -Sektion abgebrochen und ein neues Sollteilchen definiert werden.

In Abbildung 25 ist der von KONUS genutzte longitudinale Phasenraum schwarz markiert.

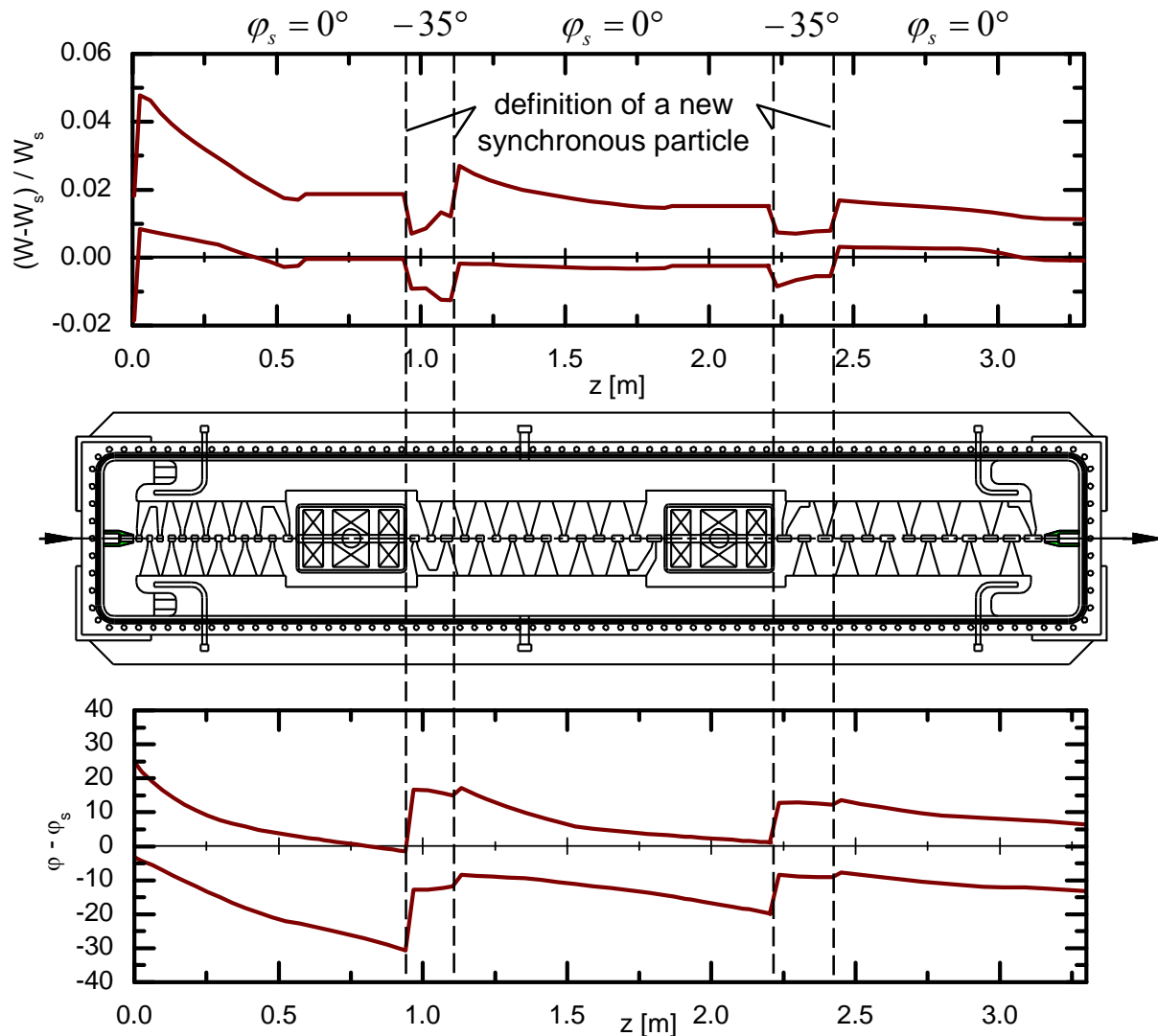


**Abbildung 25** Einzelteilchenbahnen im  $\Delta W / W_s - \Delta\varphi$  Phasenraum bei  $\varphi_s = 0^\circ$ . Der schwarz markierte Bereich wird von KONUS verwendet (Quelle: [17]).

Die daraus resultierenden Vorteile gegenüber dem in Kapitel 2.2 vorgestellten konventionellen Ansatz mit durchgehend negativer Sollphase sind folgende:

- Höherer Energiezuwachs der Teilchen, da das beschleunigende Feld bei  $\varphi_s = 0^\circ$  maximal ist.
- Eine geringere transversale Defokussierung (bei  $\varphi_s = 0^\circ$  ist diese exakt 0, wie man aus den Gleichungen (2.67) bis (2.69) erkennt). Somit sind längere Beschleunigerabschnitte ohne transversale Fokussierungselemente möglich.
- Gegen Ende der  $0^\circ$ -Sektion wandert der Teilenschwerpunkt zu deutlich negativen Sollphasen hin, so dass in den letzten Spalten eine ähnliche longitudinale Fokussierung wie bei der konventionellen „negativen Sollphasenstruktur“ erfolgen kann.

Am Ende der  $0^\circ$ -Sektion befindet sich ein Element zur transversalen Fokussierung – meist ein magnetisches Quadrupol-Triplett, wie aus Abbildung 26 ersichtlich. Für die Bewegung im longitudinalen Phasenraum ist dieses Element gleich einer Driftstrecke und muss deshalb möglichst kurz sein, um die Phasenbreite des Strahls möglichst wenig anwachsen zu lassen. Deshalb versucht man, maximale Feldstärken in den Linsen zu erreichen und den Bereich zwischen aufeinanderfolgenden Driftröhrensektionen zu minimieren.



**Abbildung 26** Verlauf der Strahlenveloppen  $\Delta W / W_s$  und  $\varphi - \varphi_s$  entlang der Z-Achse am Beispiel der IH-Struktur des GSI-Hochladungsinjektors [3].

Bei niedrigen Teilchenenergien ist es in Bezug auf die Längenreduktion am effektivsten, die magnetischen Linsen in den Tank zu integrieren (vergl. Abbildung 26).

Jedoch verlässt der Strahl den Linsenbereich longitudinal defokussiert. Es folgt daher eine typischerweise aus 3-7 Spalten bei  $\varphi_s = -35^\circ$  bestehende „Rebunching-Sektion“, analog zur konventionellen negativen Sollphasenstruktur.

Damit ist eine KONUS-Strukturperiode abgeschlossen. Diese kann beliebig oft fortgesetzt werden, wie man am Beispiel aus Abbildung 26 erkennt.

In Abbildung 26 sind ungewöhnliche Sprünge im Verlauf der Strahlenveloppen von  $\Delta W / W_s$  und  $\varphi - \varphi_s$  zu erkennen. Diese rühren von der wiederholten Neudefinition des Sollteilchens her und treten nur dann in Erscheinung, wenn man die Teilchenkoordinaten in Bezug auf das jeweils gültige Sollteilchen (mit den Koordinaten  $\varphi_s, W_s$ ) darstellt. Die Sprünge sind also künstlicher Natur und würden bei einer Darstellung der longitudinalen Strahlenveloppen in Bezug auf das Schwerpunktteilchen (Koordinaten  $\varphi_{cp}, W_{cp}$ ) nicht mehr auftreten.

Es bleibt noch die Frage zu klären, wie die wiederholte Neudefinition des Sollteilchens entlang der Struktur technisch realisierbar ist:

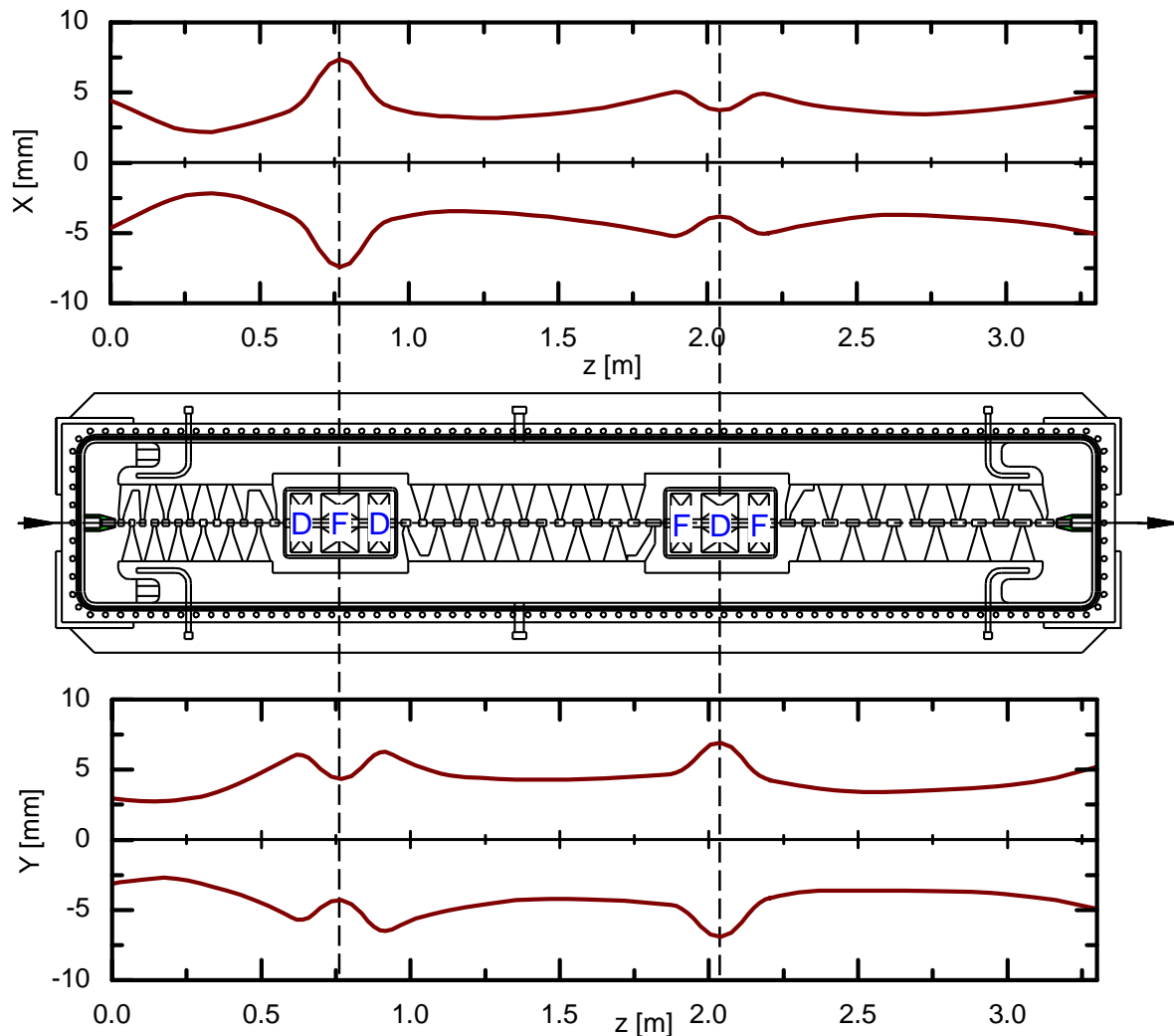
- Bei der Neudefinition der Sollteilchenenergie  $W_s$  bekommt die tatsächlich gebaute Beschleunigerstruktur ein Geschwindigkeitsprofil (d.h. Periodenlängen), wie sie der Geschwindigkeit des „gedachten“ Sollteilchens entsprechen würden. In der Rebunching-Sektion bei  $\varphi_s = -35^\circ$  sind Sollteilchen und Schwerpunkt der Verteilung identisch, also  $W_s = W_{cp}$ . In der  $0^\circ$ -Sektion dagegen definiert man ein neues Sollteilchen mit geringerer Energie als der Schwerpunkt der Teilchenverteilung, also  $W_s < W_{cp}$ . Damit hat der Teilchenpuls eine höhere Einschussenergie als das gedachte Sollteilchen.
- Bei der Neudefinition der Sollphase  $\varphi_s$  (z.B. beim Phasensprung  $-35^\circ \rightarrow 0^\circ$ ) gibt es folgende Optionen: Wenn sich zwei aufeinander folgende Spalte in der gleichen Kavität befinden und über die HF-Schwingung der Kavität miteinander gekoppelt sind, muss die geometrische Länge zwischen den Spaltmitten angepasst werden. Befinden sich die Spalte in unterschiedlichen Kavitäten, so ist ihre Phasenbeziehung zueinander beliebig und kann im Betrieb des Beschleunigers („Operating“) passend eingestellt werden.

### 3.1.2. Strukturperiode der transversalen Bewegung: Quadrupol-Triplett-Kanal

Die KONUS-Strahldynamik basiert im transversalen Phasenraum auf einem Quadrupol-Triplett-Kanal mit DFD 0 FDF 0 Fokussierung, wie am Beispiel aus Abbildung 27 illustriert. Die Eigenschaften eines solchen periodisch fokussierenden Kanals im Zusammenspiel mit der longitudinalen KONUS-Dynamik wurden ebenfalls systematisch untersucht und mehrfach beschrieben ([12,17,30]), sodass im vorliegenden Kapitel nur die Grundzüge der transversalen KONUS-Strahldynamik erläutert werden, um einen Bezug zu den im Rahmen der Arbeit entwickelten Werkzeugen herzustellen.

Die abwechselnde Linsenpolarität DFD 0 FDF 0 (vergl. Abbildung 27) hat sich als vorteilhaft gegenüber den Anordnungen DFD 0 DFD 0 oder FDF 0 FDF 0 erwiesen, sowohl aus der praktischen Erfahrung mit allen bisherigen KONUS-Entwürfen, als auch durch die Ergebnisse der systematischen Untersuchungen aus Referenz 30 bestätigt.

Bei gleichbleibenden Polaritäten der Quadrupoltriplettlinen sind nämlich die Strahlenveloppen in der  $x$ - $z$ - und der  $y$ - $z$ -Ebene unterschiedlich groß. Dadurch wird die Driftröhrenstruktur ineffizienter, weil man größere Driftröhrendurchmesser benötigt. Der asymmetrische Strahl verursacht außerdem Probleme bei hohen Strahlintensitäten, da sich die radialen Raumladungskräfte in beiden transversalen Ebenen unterschiedlich auswirken. Nicht zuletzt haben die Triplettkonfigurationen DFD und FDF unterschiedliche Brennweiten und bewirken somit auch unterschiedliche Phasenvorschübe  $\sigma_x$  und  $\sigma_y$  (Definition gemäß Gleichung (2.34)). Diese Tatsache ist insbesondere bei Strahldynamik-Auslegungen intensiver Teilchenstrahlen störend, da man bei Variation des Strahlstromes strahlinduzierte Resonanzen bzw. Instabilitäten generieren kann, welche in diesem Fall in beiden transversalen Ebenen für unterschiedliche Strahlströme auftreten können.



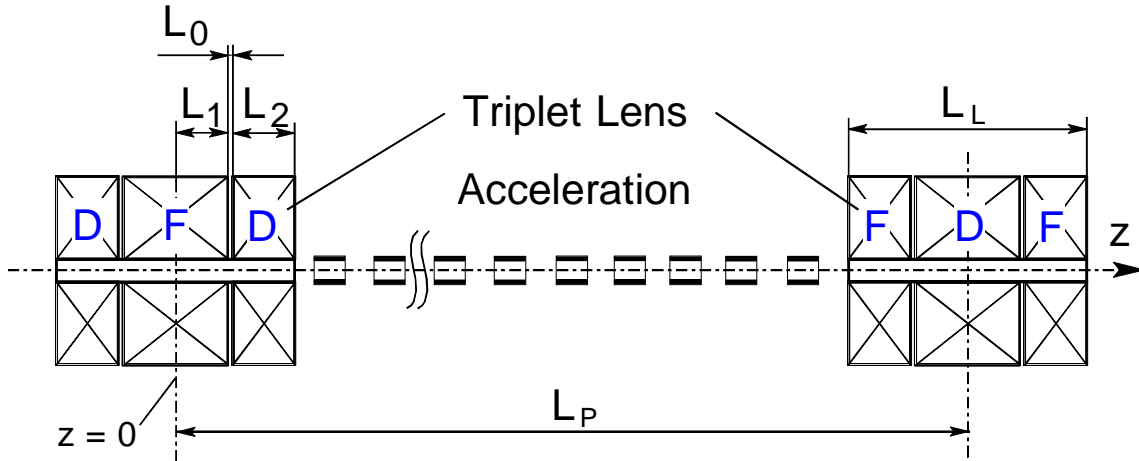
**Abbildung 27** Verlauf der transversalen Strahlenveloppen entlang der Z-Achse am Beispiel der IH-Struktur des GSI-Hochladungsinjektors [3].

Im Unterschied zum F0D0-Konzept kann man beim Quadrupol-Triplett-Kanal die Längen und Gradienten  $B'$  der einzelnen Singulets so kombinieren, dass jedes Tripletts unabhängig von seiner Polarität in beiden Ebenen fokussierend wirkt (vergl. Abbildung 27). Insofern hat man eine Anordnung von ausschließlich fokussierenden Linen  $F_1F_2F_3$  mit  $F_1=DFD$  und  $F_2=FDF$  und mit entsprechend unterschiedlichen Brennweiten.

Deshalb beträgt die Strukturperiode – analog zum F0D0-Kanal – den doppelten Triplettabstand (vergl. Abbildung 17 für den F0D0-Kanal), da sich nach jedem zweiten

Triplett die Polarität wiederholt.

Die Strukturperiode der longitudinalen KONUS-Dynamik enthält jedoch nur jeweils eine Tripletlinse (welche im longitudinalen Phasenraum wie eine Driftstrecke wirkt, vergl. Abbildung 26). Um mit dieser Definition der KONUS-Strukturperiode konform zu bleiben, wurde die transversale KONUS-Periode  $L_P$  so definiert, dass nur ein Driftröhrenabschnitt darin enthalten ist, also als Abstand zwischen den Mitten zweier aufeinander folgender Triplettlinsen mit ungleicher Polarität gemäß Abbildung 28:



**Abbildung 28** Definition der transversalen KONUS-Strukturperiode der Länge  $L_P$  (Quelle: [17]).

Die Gesamtübertragungsmatrix entlang der so definierten KONUS-Periode lautet:

$$M_{QTK} = M_{D/2} \times M_0 \times M_F \times M_G \times M_D \times M_0 \times M_{F/2} \quad (3.1)$$

Dabei ist:

- $M_F, M_D =$  Transfermatrix eines fokussierenden bzw. defokussierenden Quadrupols gemäß Gleichungen (2.26) und (2.27). 1/2 bezeichnet die halbe Singulettlänge.
- $M_0 =$  Transfermatrix einer Driftstrecke, in diesem Fall der Länge  $L_0$ .
- $M_G =$  Transfermatrix für die HF-Defokussierung im Beschleunigungsspalt gemäß Gleichung (2.69). Dabei ist  $M_G$  das Matrixprodukt aller in der Sektion befindlichen Beschleunigungsspalte und Driftstrecken.

Der im Rahmen der F0D0-Strahldynamik entwickelte Formalismus aus Kapitel 2.3.4 kann hier uneingeschränkt eingesetzt werden. Daher können die Koeffizienten der Übertragungsmatrix  $M_{QTK}$  (Gleichung (3.1)) dazu verwendet werden, die Courant-Snyder-Parameter  $\alpha, \beta, \gamma$  für den angepassten Strahl sowie den transversalen Phasenvorschub  $\sigma_x$  bzw.  $\sigma_y$  mittels Gleichung (2.48) zu ermitteln.

Entsprechend gilt auch das bereits bekannte Stabilitätskriterium  $|\cos \sigma| < 1 \Leftrightarrow \sigma < 180^\circ$  aus Gleichung (2.45). Allerdings muss berücksichtigt werden, dass die eigentliche Strukturperiode wegen der abwechselnden Linsenpolarität (DFD – FDF usw.)  $2 \cdot L_P$  beträgt, während KONUS nur die „einfache“ Periodenlänge  $L_P$  gemäß Abbildung 28 verwendet.

Erst nach  $2 \cdot L_P$  gilt nämlich:

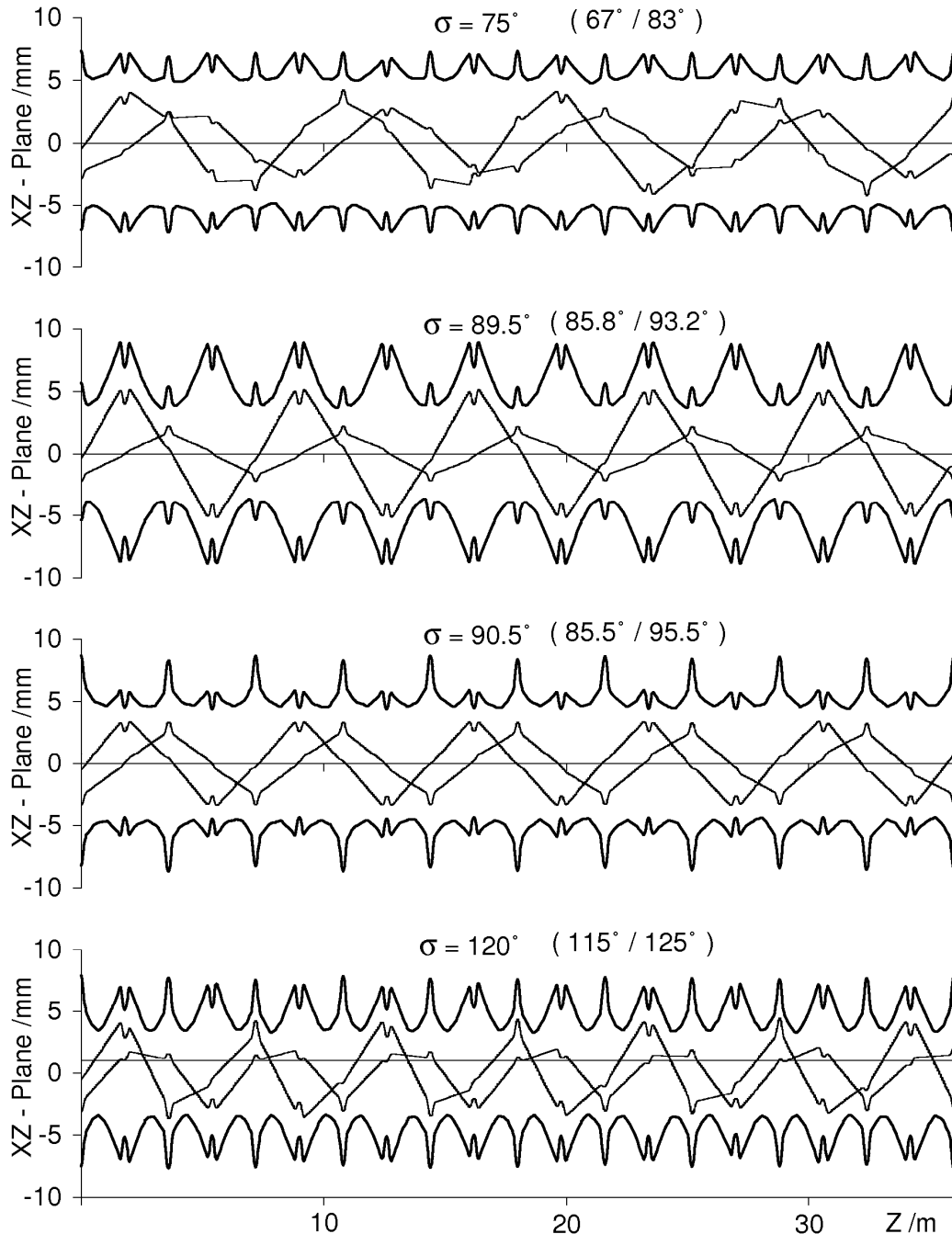
$$M(z + 2 \cdot L_P | z) = M_{QTK,2} \times M_{QTK,1} = M(z + 2 \cdot L_P | z + L_P) \times M(z + L_P | z) = M(z) \quad (3.2)$$

Somit lautet das Stabilitätskriterium für die transversale Teilchenbewegung in einer KONUS-Strukturperiode  $\sigma_{t,L_P} < 90^\circ$ .



Als weitere Folge dieser Definition gilt  $\sigma_{x,L_p} \neq \sigma_{y,L_p}$  (vergl. Abbildung 29).

Im Unterschied zum F0D0-Kanal gibt es im KONUS-Kanal aber auch stabile Lösungen für  $\sigma_{t,L_p} > 90^\circ$ . Anders als beim F0D0-Kanal sind nämlich die Fokussierungsstärken aufeinanderfolgender Triplets unterschiedlich, d.h.  $\kappa_{DFD} \neq \kappa_{FDF}$ . Dadurch kann man auch für  $\sigma_{t,L_p} > 90^\circ$  durch geeignete Anpassung der voneinander unabhängigen Fokussierungsstärken  $\kappa_{DFD}$  und  $\kappa_{FDF}$  stabile Lösungen erhalten, wie das Beispiel aus Abbildung 29 demonstriert:



**Abbildung 29** Quadrupol-Triplett-Kanal mit FDF 0 DFD 0 – Polarität bei verschiedenen transversalen Phasenvorschieben  $\sigma$  (Quelle: [17]).

Für  $\sigma_{t,L_p} = 90^\circ$  (bzw.  $\sigma_t = 180^\circ$  über die gesamte Strukturperiode  $2 \cdot L_p$ ) existiert aber auch für den Quadrupol-Triplett-Kanal keine stabile Lösung der Teilchenbewegung im transversalen Phasenraum. Formal ist dann nämlich die Bedingung  $|Sp(M(z + 2 \cdot L_p | z))| < 2$  nicht mehr erfüllt und es lassen sich wegen  $\sin(\sigma_{2 \cdot L_p}) = 0$  auch keine Courant-Snyder-Parameter  $\alpha, \beta, \gamma$  für den angepassten Strahl nach Gleichung (2.46) angeben. Anschaulich befindet sich jede zweite Triplettlinse genau im Fokus des vorhergehenden Triplets mit umgekehrter Polarität, so dass sie wirkungslos bleibt. Somit lautet die Stabilitätsbedingung für die transversale KONUS-Dynamik:

$$\sigma_{t,L_p} \neq \pi/2 \quad (3.3)$$

In einem Intervall nahe bei  $\sigma_{t,L_p} = 90^\circ$  gibt es noch ein numerisches Ergebnis für die Courant-Snyder-Parameter  $\alpha, \beta, \gamma$ . Jedoch sind aufeinander folgende Triplets unterschiedlich stark ausgeleuchtet und die Strahlenvelope bleibt zwar endlich, wächst aber lokal (im Bereich der Triplettlinse) so stark an, dass keine realistische strahldynamische Auslegung mehr möglich ist (zum Vergleich auch Abbildung 29 für  $\sigma_{t,L_p} = 89.5^\circ$  und  $\sigma_{t,L_p} = 90.5^\circ$ ).

Systematische Untersuchungen ([12,17,30]) haben gezeigt, dass man die Intervallbreite der instabilen Bewegung durch geeignete Wahl der Linsenstärken  $\kappa_{DFD}$  und  $\kappa_{FDF}$  bzw. der Längen der einzelnen Singulets (nach Abbildung 28 gleich  $2 \cdot L_1$  und  $L_2$ ) minimieren kann.

Benutzt man zum Beispiel gleiche Feldgradienten  $B'_1 = B'_2$ , so ist ein typisches Längenverhältnis

$$L_1 / L_2 \in [0.9 - 1.0] \quad (3.4)$$

je nach Teilchengeschwindigkeit und Linsen-Füllfaktor zu wählen.

In Abbildung 29 wird ein Beispiel für die erreichbare Strahlenveloppenanpassung nahe  $\sigma_{t,L_p} = 90^\circ$  bei optimaler Wahl des Längenverhältnisses  $L_1 / L_2$  gezeigt. Trotzdem kann man erst bei Phasenvorschüben, die weiter entfernt von  $90^\circ$  sind, also z.B.  $75^\circ$  oder  $120^\circ$  von einer gleichmäßigen Ausleuchtung aller Triplets entlang des Kanals sprechen.

Man erkennt außerdem in Abbildung 29, dass die Strahlenvelope im Zwischenbereich der Linsen (d.h. am Ort der Beschleunigungsspalte) für  $\sigma_{t,L_p} > 90^\circ$  wesentlich schlanker ist als z.B. für  $\sigma_{t,L_p} = 75^\circ$ . Dies ermöglicht den Einbau von Driftröhren mit kleineren Innendurchmessern und somit den Einsatz effizienterer Driftröhrenbeschleuniger (im Falle von H-Mode Kavitäten wächst die Shuntimpedanz - Gleichung (2.5) - wenn man das Verhältnis Driftröhren- zu Resonatordurchmesser minimiert).

Daher ergibt sich in der Praxis bei vielen KONUS-Strahldynamikauslegungen mit niedriger Strahlintensität ein typischer transversaler „Nullstrom“-Phasenvorschub von  $\sigma_{0,t,L_p} \approx 120^\circ$ .

Für hohe Strahlintensitäten muss analog zum F0D0-Kanal  $\sigma_{0,t,L_p} < 90^\circ$  erfüllt sein, um strahlinduzierte Instabilitäten zu vermeiden.

### 3.2. Das Teilchensimulationsprogramm LORASR

LORASR steht für „Longitudinale und transversale Strahltransportrechnungen unter Berücksichtigung der Raumladung“.

Es ist ein Simulationsprogramm zur Berechnung der Strahldynamik in Driftröhren-Linearbeschleunigern. Es können sowohl  $\beta\lambda$ -Strukturen (z.B. vom Alvarez-Typ) als auch  $\beta\lambda/2$ -Strukturen (z.B. H-Mode Kavitäten) behandelt werden. Darüber hinaus sind Berechnungen kurzer RFQ-Strukturen möglich und als Fokussierungselemente wurden magnetische Dipole, Quadrupole und Solenoide implementiert (näheres hierzu in Kapitel 3.2.1).

Es gibt in LORASR keine prinzipielle Einschränkung in Bezug auf das zugrunde gelegte Strahldynamikkonzept (z.B. negative Sollphasenstruktur mit F0D0-Fokussierung) und die verwendete Driftröhrenstruktur (z.B. Alvarez-Resonator), jedoch wurde das Programm parallel zur KONUS-Strahldynamik entwickelt und ist demzufolge hochgradig auf KONUS-Designs mit  $\beta\lambda/2$  H-Mode-Kavitäten als Hauptbeschleunigerstruktur spezialisiert.

Die aktuelle LORASR-Version wurde mit dem kommerziellen „Lahey Fortran 95“ Compiler [31] erstellt und ist auf Windows<sup>®</sup>-basierten PCs mit dem jeweils aktuellen Betriebssystem (zurzeit Windows XP<sup>®</sup> bzw. Windows Vista<sup>®</sup>) lauffähig.

In der Einleitung wurde bereits ausführlich darüber berichtet, welche realisierten oder geplanten Linearbeschleuniger mit LORASR strahldynamisch berechnet wurden und es wurde zugleich dargelegt, warum die Mehrzahl der im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelten Simulationswerkzeuge direkt in die LORASR-Programmentwicklung eingeflossen sind.

Diese Argumente (zugleich als Motivation für die vorliegende Arbeit anzusehen) werden als Vorspann zur Beschreibung des LORASR-Programms nochmals kurz aufgelistet:

- Es gibt zurzeit weltweit kein anderes auf die KONUS-Strahldynamik spezialisiertes Teilchensimulationsprogramm. Wegen der KONUS-spezifischen Trennung von Sollteilchen und Schwerpunktteilchen ist es mit anderen Simulationsprogrammen entweder gar nicht möglich, die KONUS-Strahldynamik korrekt zu berechnen, oder die Eingabe ist so kompliziert, dass diese Programme bestenfalls zur Überprüfung („Benchmarking“) eines fertigen Entwurfs aber nicht für ein neues KONUS-Design geeignet sind.
- Die am IAP laufend weiterentwickelten H-Mode Resonatoren können nur dann zum Einsatz kommen, wenn neben der hohen Beschleunigungseffizienz dieser Strukturen auch mit einem robusten strahldynamischen Konzept überzeugt werden kann.
- Hierzu musste LORASR den aktuellen Anforderungen aus der Beschleunigerphysik angepasst werden, insbesondere in Bezug auf die Behandlung der Raumladungskraft (vergl. Kapitel 4 und 5) sowie auf die genaue Quantifizierung und Analyse von Strahlverlusten (vergl. Kapitel 6).

#### 3.2.1. Verfügbare Beschleunigungs- und Strahlführungselemente

Eine ausführliche LORASR-Programmbeschreibung zu einem Zeitpunkt vor Beginn der vorliegenden Arbeit ist in Referenz [17] zu finden.

Nachfolgend werden deshalb nur die wichtigsten Elemente und Programmmerkmale - in Tabelle 3-1 zusammengefasst – knapp vorgestellt und kommentiert.

**Tabelle 3-1 In LORASR vor Beginn der vorliegenden Arbeit bereits verfügbare Berechnungsroutinen (Elemente).**

Element	Beschreibung
Beschleunigungsspalt	Parametrische Eingabe der Spaltfeldverteilung für 10 verschiedene Spaltgeometrien (Spalllänge / Innendurchmesser = $g / \varnothing_i$ ) $\beta\lambda/2$ -Strukturen: Parametersatz gilt für dünnwandige Driftröhren (IH- und CH-Kavität, vergl. Abbildung 30) mit festem Außen- zu Innendurchmesser von $\varnothing_a / \varnothing_i = 1.4$ . $\beta\lambda$ -Strukturen: Parametersatz gilt für Driftröhren mit $\varnothing_a \gg \varnothing_i$ (als magn. Linsengehäuse) wie sie in Alvarez-Kavitäten vorkommen.
RFQ Sektion	Berechnung der Strahldynamik in einem RFQ-Beschleuniger basierend auf dem Standard RFQ 2-Term Potential [32] und mit separater Behandlung der Randfelder an den Elektrodenenden.
Magnetischer Quadrupol	Berechnung gemäß Gleichungen (2.26) und (2.27) in der „Hard-Edge-Approximation“, d.h. ohne Randfelder.
Dipolmagnet	Bewegung in einem konstanten Dipolfeld, beschrieben durch die Lorentzkraft; Matrixformalismus basierend auf einer Taylor-Multipolentwicklung in 2. Ordnung; Berücksichtigung von Randfeldern. Die Implementierung der Dipolroutine in LORASR war Teil einer Dissertation [33] und wird darin ausführlich beschrieben.
Behandlung der Raumladungskraft	„Particle in cell“ Approximation, d.h. die Teilchen werden auf die Gitterpunkte eines kartesischen Gitters verteilt und die Kraftkomponenten auf jedes Teilchen durch Aufsummieren der Coulombkraft-Beiträge aller Gitterpunkte ermittelt.

Es folgen einige Anmerkungen zu einzelnen Elementen aus Tabelle 3-1:

### RFQ Sektion

Beim GSI-Hochstrominjektor [4] erfolgt die Strahlanpassung in die erste IH-Kavität durch eine kurze „Matching-RFQ“ Kavität bestehend aus 11 identischen Zellen mit  $\varphi_s = -90^\circ$ , die sogenannte „Superlinse“ [34]. Wegen der räumlichen Begrenztheit des Ensembles aus RFQ und Driftröhrenbeschleuniger war es naheliegend, die strahldynamische Optimierung mit einem einzigen Programm durchzuführen.

Aus diesem Anlass wurde in LORASR eine RFQ-Routine, basierend auf der 2-Term-Potentialbeschreibung gemäß Referenz [32] implementiert. Wegen  $\varphi_s = -90^\circ$  ist der Ein- und Ausgangsbereich des Matching-RFQs sehr störanfällig in Bezug auf Randfelder, da sich die Elektroden beim Teilchendurchgang durch diese Regionen auf maximalem Potential befinden. Deshalb werden in den Berechnungen mit LORASR auch Randfelder berücksichtigt. Diese werden mittels einer von Crandall vorgeschlagenen analytischen Multipolentwicklung dargestellt [35].

Es muss jedoch an dieser Stelle betont werden, dass LORASR kein auf das Design von RFQ-Beschleunigern spezialisiertes Programm ist. Die RFQ-Routine wurde bislang nur im Rahmen der obengenannten speziellen Anwendung verwendet.

## Dipolmagnet

Ähnlich wie das Element „RFQ Sektion“ wurde auch die Komponente „Dipolmagnet“ aus einem speziellen Anlass in LORASR implementiert und wird nicht standardmäßig für Beschleunigerdesigns eingesetzt, da oft für die Berechnung der Transportstrecken mit Ablenkmagneten vor oder hinter dem Hauptbeschleuniger eigene darauf spezialisierte Programme eingesetzt werden.

In diesem Fall jedoch sollte ein „rezirkulierender Linearbeschleuniger“ untersucht werden, bei welchem am Ende eines Linearbeschleunigerabschnittes eine 180°-Umlenkung durch Dipolmagnete folgt, mit anschließendem Einschuss in den nächsten Linearbeschleunigerabschnitt usw. [33],[36]. Ein solcher „gefalteter Linearbeschleuniger“ ist besonders attraktiv, um die Baulänge des Beschleunigertunnels zu reduzieren, indem mehrere Beschleunigersektionen den gemeinsamen Tunnel mit angeschlossener Versorgung nutzen können. Eine entsprechende Lösung könnte zum Beispiel für die Erhöhung der Ausgangsenergie des UNILAC-Beschleunigers bei der GSI Darmstadt in Frage kommen.

Es war daher auch in diesem Fall naheliegend, die aufeinanderfolgenden Linearbeschleunigerabschnitte gemeinsam mit den zwischengelagerten 180°-Bögen in LORASR zu simulieren. Eine detaillierte Beschreibung der hierfür in LORASR implementierten Dipolroutine findet man in der Referenz [33].

Gegenwärtig findet die LORASR-Dipolroutine ebenfalls Anwendung beim Design des Bunchkompressors vom Mobley-Typ für die „Frankfurter Neutronenquelle am Stern Gerlach Zentrum“ FRANZ [37].

## Beschleunigungsspalt

Für LORASR wurde ein besonderes Augenmerk auf eine möglichst genaue Berechnung der Transformation der Teilchenkoordinaten durch den Beschleunigungsspalt gerichtet. Eine hohe Genauigkeit ist erforderlich, weil LORASR traditionell für Designs von Schwerionenbeschleunigern bei niedrigen Energien ( $\beta$  typischerweise zwischen 0.01 und 0.3) entwickelt wurde, bei welchen die transversale Ablenkung im Spalt (vergl. Gleichung (2.69)) eine erhebliche Rolle spielt.

Daher wird das Spaltvolumen, wie in Abbildung 30 dargestellt, in 20 Ringe aufgeteilt, und zwar in 5 longitudinale und 4 radiale Zonen.

Die Zonengrenzen der radialen Zonen betragen (vergl. Abbildung 30):

$$r_i = 0; \quad 0.2 \cdot \varnothing_i; \quad 0.315 \cdot \varnothing_i; \quad 0.4 \cdot \varnothing_i$$

In jedem Ringsegment wird das beschleunigende Feld  $E_z(z, r)$  linear angenähert, wie in Abbildung 30 ersichtlich. Die zugrunde gelegten Feldverläufe wurden für dünnwandige Driftröhren mit  $\varnothing_a / \varnothing_i = 1.4$  mit dem elektrostatischen Programm PE2D berechnet [38].

Darüber hinaus ist auch ein Parametersatz für „massive“ Driftröhren verfügbar, wie sie bei  $\beta\lambda$ -Strukturen vom Alvarez-Typ vorkommen. Diese wurden mit CST Microwave Studio<sup>®</sup> [16] berechnet, anlässlich der Validierung von LORASR im Rahmen der HIPPI-Kollaboration (vergl. Kapitel 5).

Der Parametersatz enthält 10 normierte Spaltgeometrien, die durch folgende Spaltlänge zu Innendurchmesser-Verhältnisse  $g / \varnothing_i$  gekennzeichnet sind:

$$(g / \varnothing_i)_n = \frac{2}{3}; \quad 1; \quad \frac{4}{3}; \quad \frac{5}{3}; \quad 2; \quad \frac{7}{3}; \quad \frac{8}{3}; \quad \frac{10}{3}; \quad 4; \quad \frac{14}{3}$$

Die radiale Feldkomponente  $E_r(z, r)$  kann aus  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$  ermittelt werden.

In zylindrischen Koordinaten gilt:

$$\frac{\partial E_r}{\partial r} + \frac{1}{r} E_r + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0 \quad (3.5)$$

Die radiale Feldkomponente  $E_r(z, R)$  am genauen Ort  $R$  eines jeden Teilchens lässt sich durch Integration von 0 bis  $R$  wie folgt näherungsweise berechnen:

$$E_r(z, R) = -\frac{1}{2R} \sum_{i=1}^n \left( \frac{dE_z}{dz} \right)_i \cdot (r_i^2 - r_{i-1}^2) \quad (3.6)$$

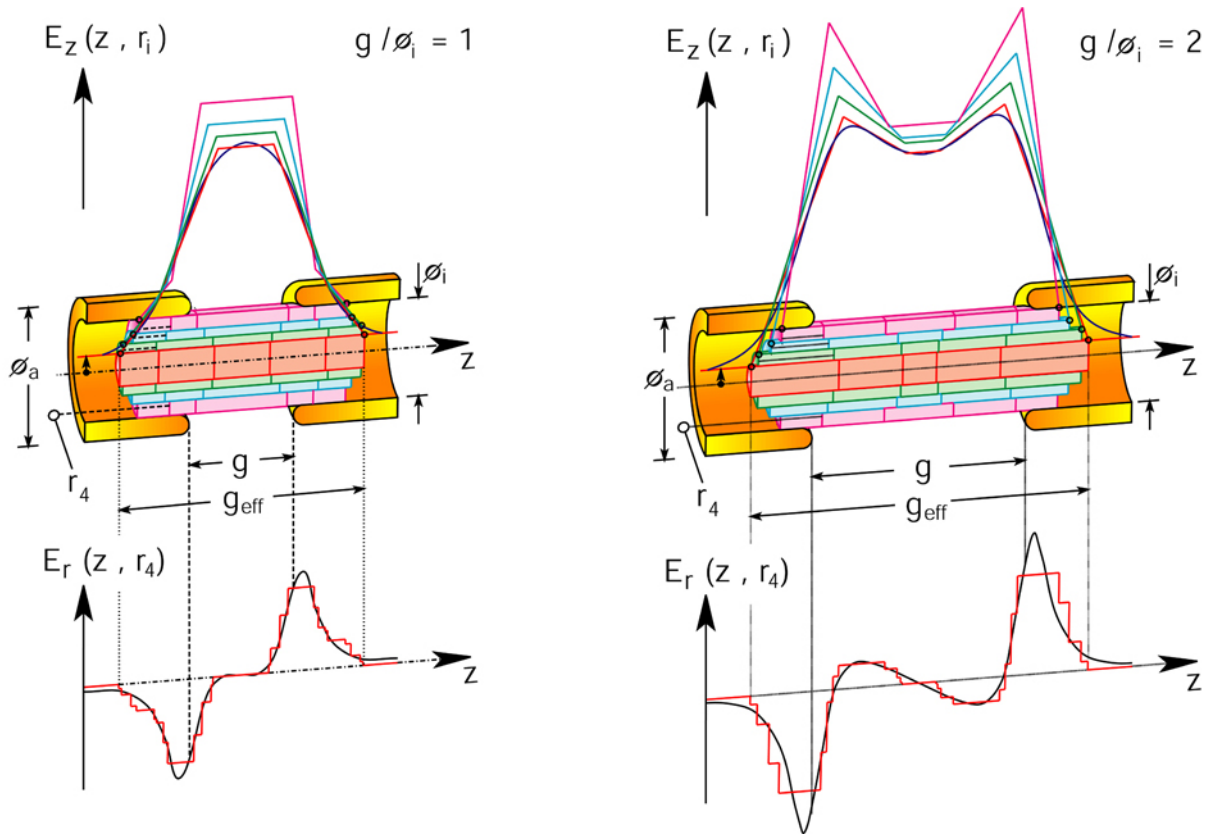
Dabei ist:

$R$  = Die radiale Teilchenkoordinate.

$i$  = Der Index der radialen Zone.

$r_0$  bis  $r_{n-1}$  = Die Zonengrenzen.

$r_n$  =  $R$

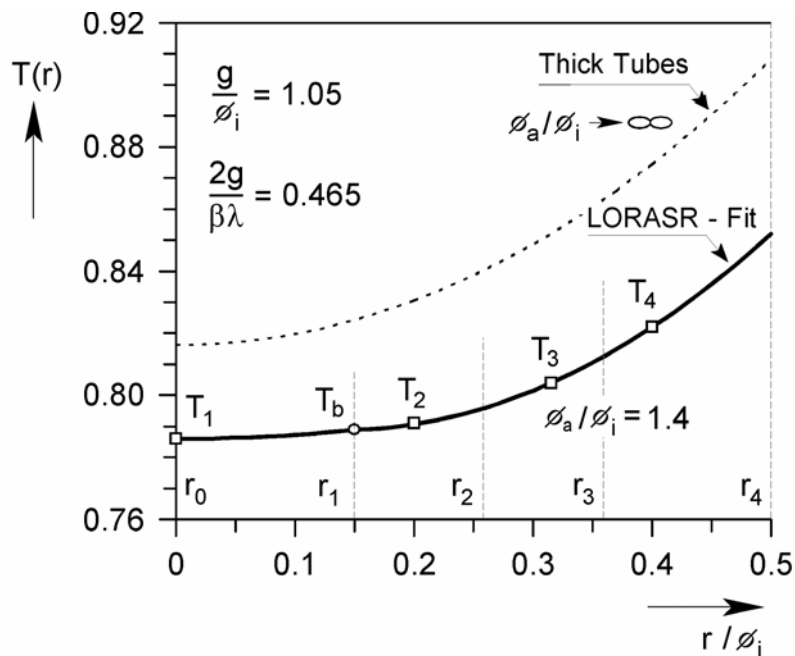


**Abbildung 30** In LORASR verwendete  $\vec{E}$ -Feld-Näherungen für verschiedene Spaltgeometrien (Quelle: [17]).

Darüber hinaus wird der Transit-Time-Faktor (Definition gemäß Gleichung (2.8)) mit der gleichen Genauigkeit bestimmt, und zwar zunächst für das Sollteilchen ( $T_1$  auf der Strahlachse, vergl. Abbildung 31) und später auch  $T_2$  bis  $T_4$  für die drei äußeren radialen Zonen, indem man in einem iterativen Prozess mit geschätzten Anfangswerten für den Transit-Time-Faktor und die Sollphase am Spalteingang anfängt.

Der Transit-Time-Faktor  $T(R)$  am genauen Ort  $R$  eines beliebigen Teilchens wird durch eine parabolische Interpolation zwischen  $T_1$  und  $T_4$  berechnet.

Abbildung 31 zeigt ein Beispiel für einen relativ kurzen Spalt mit  $(g/\varnothing_i) \approx 1$  und macht deutlich, dass der Transit-Time-Faktor für dünnwandige Driftröhren um einige Prozent kleiner ist als für Driftröhren mit  $(\varnothing_a/\varnothing_i) \rightarrow \infty$  (gestrichelte Linie in Abbildung 31), so dass der für letztere bekannte analytische Ausdruck (z.B. aus Referenz [19]) hier kein korrektes Ergebnis liefern würde.



**Abbildung 31** Vergleich der in LORASR für dünnwandige Driftröhren berechneten Transit-Time-Faktoren mit den Werten für dickwandige Driftröhren (Quelle: [17]).

### 3.2.2. Programmerweiterungen im Rahmen der vorliegenden Arbeit

Alle im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelten Simulationswerkzeuge mit LORASR-Relevanz werden in den Kapiteln 4-7 ausführlich beschrieben. Einen kompakten Überblick bietet auch Referenz [39].

Es wird deshalb als Abschluss des Kapitels über das LORASR-Strahldynamikprogramm lediglich eine tabellarische Übersicht der neu hinzugekommenen Programmelemente gegeben, um diese von den bereits vorhandenen und im vorhergehenden Abschnitt beschriebenen Elemente abzugrenzen und als „Ertrag“ der vorliegenden Arbeit hervorzuheben.

**Tabelle 3-2** In LORASR im Rahmen der vorliegenden Arbeit neu hinzugekommene Programmelemente.

Element	Beschreibung
Solenoid	Berechnung mittels Lorentzkraft-Komponenten nach Abbildung 13, „Hard-Edge-Approximation“, d.h. ohne Randfelder.
Behandlung der Raumladungskraft	„Particle in cell“ Approximation, basierend auf einem 3D FFT Algorithmus (FFT = „Fast Fourier Transform“; schnelle Fourier-Transformation). Nähere Beschreibung in Kapitel 4.

Element	Beschreibung
Simulation von Maschinenfehlern	<p>Folgende Fehlerarten können mit LORASR simuliert werden:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Verschiebung <math>\Delta X</math>, <math>\Delta Y</math> der fokussierenden Elemente (Quadrupole oder Solenoide).</li> <li>- Rotation <math>\Delta\phi_x</math>, <math>\Delta\phi_y</math>, <math>\Delta\phi_z</math> der fokussierenden Elemente (Quadrupole oder Solenoide).</li> </ul> <p>Die obengenannten Fehler können Konstruktions- oder Justagefehler sein.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Schwankungen der Spaltspannungsamplituden für einzelne Beschleunigungsspalte <math>\Delta U_{ij}</math> (z.B. durch Abweichungen vom Sollwert bei der HF-Abstimmung der Kavität) sowie für den gesamten Tank <math>(I+\Delta_i) \cdot U_{ij}</math> (verursacht durch Schwankungen der HF-Versorgung).</li> <li>- Schwankungen der Eingangs-Tankphase <math>\Delta\Phi_i</math> (verursacht durch Schwankungen der HF-Versorgung).</li> </ul> <p>Nähere Beschreibung in Kapitel 6</p>
„Batch“-Modus zur Untersuchung statistischer Maschinenfehler	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Bis zu 9999 Läufe mit bis zu <math>10^6</math> Simulationsteilchen mit anschließender Protokollierung der Setzwerte für die Maschinenfehler und der Ergebnisse einzelner Läufe.</li> <li>- Läufe mit verschiedenen Setzwerten für die Fehler können auf verschiedenen Rechnern ausgeführt werden. Die Ergebnisse können gemeinsam zur Analyse herangezogen werden.</li> </ul> <p>Nähere Beschreibung in Kapitel 6</p>
Erweiterte Analysemöglichkeiten	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Berücksichtigung aller Änderungen der Apertur entlang des Beschleunigers, und somit genaue Lokalisierung der Strahlverluste durch Berühren der Apertur.</li> <li>- Erstellung von Strahlverlustprofilen.</li> <li>- Berechnung von Apertur-Füllfaktoren bei Maschinenfehlern.</li> <li>- Berechnung von zusätzlichen Emittanzwachstumsraten bei Maschinenfehlern.</li> </ul> <p>Nähere Beschreibung in Kapitel 6</p>



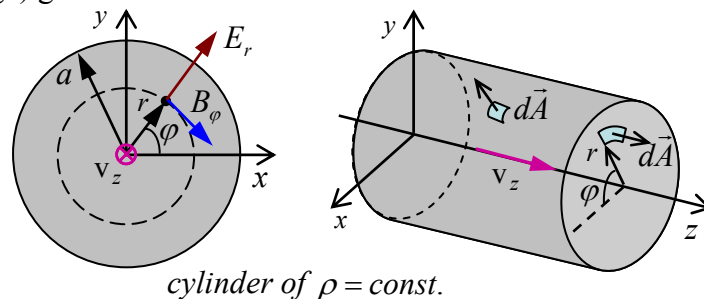
## 4. Eine neue Vielteilchenroutine basierend auf einem PIC-FFT Algorithmus

### 4.1. Definition und Bedeutung der Raumladungskraft für die Teilchendynamik in Driftröhren-Linearbeschleunigern

Bei den bisherigen Ausführungen (insbesondere zu Kapitel 2) wurde nur die Einzelteilchenbewegung unter dem Einfluss der äußeren Kräfte der Beschleunigungs- und Fokussierungselemente betrachtet, ohne den Einfluss der übrigen Strahlteilchen zu berücksichtigen.

Geladene Teilchen werden aber immer vom eigenen elektrischen Feld  $\vec{E}$  und bewegte Teilchen vom eigenen magnetischen Feld  $\vec{B}$  begleitet.

Schon die stark vereinfachte Betrachtung eines Teilchenstrahls als langen Zylinder mit homogener Ladungsdichte  $\rho$  und Radius  $a$ , welcher sich mit der Geschwindigkeit  $\vec{v}$  in Z-Richtung bewegt (vergl. Abbildung 32), zeigt, dass die Feldkomponenten  $E_r$  und  $B_\phi$  eine wesentliche Rolle spielen (man befindet sich dabei im Laborsystem). Das elektrische „Eigenfeld“ wirkt also wegen der  $E_r$ -Komponente defokussierend, d.h. lenkt die Teilchen radial von der Strahlachse Z weg, während die Magnetfeldkomponente  $B_\phi$  einen fokussierenden radialen Anteil der Lorentzkraft  $F_r$  bewirkt (vergl. Gleichung (4.2)) und somit die Wirkung von  $E_r$  teilweise kompensiert. Die Summe aus beiden Effekten charakterisiert die Stärke der Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung, welche fortan „Raumladungskraft“ (oder kurz „Raumladung“) genannt wird.



**Abbildung 32** Einfaches Modell eines kontinuierlichen zylindrischen Teilchenstrahls mit dazugehörigen Eigenfeldkomponenten  $E_r$  und  $B_\phi$ .

Die Feldkomponenten  $E_r$  und  $B_\phi$  erhält man für den Fall aus Abbildung 32 mithilfe der Maxwellgleichungen:

$$Q = \int_V \rho dV = \epsilon_0 \oint_A \vec{E} d\vec{A} \Rightarrow \int_V \rho r dr d\phi dz = \epsilon_0 \oint_A E_r r d\phi dz$$

sowie

$$\mu_0 I = \mu_0 \int_A \vec{j} d\vec{A} = \oint_s \vec{B} d\vec{s} \Rightarrow \mu_0 \int_A \rho v r dr d\phi = \oint_s B_\phi r d\phi$$

zu:

$$E_r = \frac{\rho}{2\pi\epsilon_0} r = \frac{I}{2\pi\epsilon_0\beta c} \frac{r}{a^2} \quad ; \quad B_\phi = \frac{1}{2} \mu_0 \rho \beta c r = \frac{I}{2\pi\epsilon_0 c^2} \frac{r}{a^2} \quad (4.1)$$

Dabei wurden folgende Beziehungen verwendet:

$$I = \frac{Q}{t} = \rho \pi a^2 v \quad ; \quad j = \frac{I}{A} = \rho v \quad ; \quad \mu_0 = 1/\epsilon_0 c^2$$

Mit den Beziehungen aus Gleichung (4.1) ergibt sich für den radialen Anteil der Lorentzkraft:

$$F_r = q(E_r - vB_\varphi) = \frac{qI}{2\pi\epsilon_0\beta c} (1 - \beta^2) \frac{r}{a^2} = qE_r (1 - \beta^2) = \frac{qE_r}{\gamma^2} \quad (4.2)$$

Das Ergebnis aus (4.2) lässt erkennen, dass man bei anwachsender Teilchengeschwindigkeit  $v$  einen zunehmenden Ausgleich der defokussierenden Wirkung von  $E_r$  durch die fokussierende Wirkung von  $B_\varphi$  erhält.

Defokussierung durch die Raumladung ist also in erster Linie ein nichtrelativistischer Effekt, der insbesondere für niederenergetische Ionenstrahlen hoher Intensitäten (= Strahlströme  $I$ ) relevant ist.

Die Auswirkungen der Raumladungskraft auf die Strahldynamik in Linearbeschleunigern sind vielfältig. Sie werden im Folgenden nur beispielhaft erwähnt, da die genannten Effekte nicht Gegenstand der Untersuchungen im Rahmen der vorliegenden Arbeit sind:

- Die Einzelteilchenbahnen sind nicht mehr identisch mit den für  $I \approx 0$  (d.h. für den Fall rein äußerer Beschleunigungs- und Fokussierungskräfte) berechneten Bahnen. Insbesondere wird für  $I \gg 0$  der „Nullstrom-Phasenvorschub“  $\sigma_0$  (Definition gemäß (2.34)) wesentlich reduziert ( $\sigma < \sigma_0$ ). Man verwendet für diesen Effekt den englischen Ausdruck „Tune-Depression“ (= „Phasenvorschub-Absenkung“).
- Die Absenkung von  $\sigma_0$  kann zu einem resonanten Verhalten und damit verbundenen Instabilitäten führen, insbesondere wenn die Bedingung  $\sigma \leq 90^\circ < \sigma_0$  erfüllt ist. Hierzu gibt es zahlreiche Untersuchungen, welche z.B. in [20] und [23] umfassend beschrieben werden.
- Der Ausdruck aus Gleichung (4.2) lässt eine lineare Zunahme der Raumladungskraft in radialer Richtung erkennen:  $F_r(r) \sim r$ . Dies ist jedoch nur für den Spezialfall einer homogenen Ladungsverteilung  $\rho = \text{const.}$  gemäß Abbildung 32 gültig. Im allgemeinen Fall gibt es auch nichtlineare Anteile von  $F_r(r)$ , abhängig von der jeweiligen (und zeitlich veränderlichen) Teilchenverteilung im Ortsraum. Während die lineare Komponente von  $F_r(r)$  die Strahlenvelope vergrößert, wird durch die nichtlineare Komponente von  $F_r(r)$  die Teilchenverteilung zusätzlich verzerrt, so dass sich zum Beispiel ein dünn besiedelter Bereich am Strahlrand – der sogenannte „Halo“ – bilden kann. Dieser begünstigt Strahlverluste und geht meist mit einem Anwachsen der Randemittanz des Strahls einher.
- Schließlich sind strahldynamische Berechnungen unter Berücksichtigung der Raumladung im Allgemeinen nicht mehr „selbstkonsistent“: Die Summe aus den äußeren Kräften und den Eigenkräften des Strahls führt zu einer Verschiebung der Teilchenkoordinaten im Ortsraum; die neuen Positionen ergeben ihrerseits neue Werte für die Eigenkräfte usw., so dass es zu einem geschlossenen Kreislauf kommt, dessen Lösung iterativ zu ermitteln und immer mit einem Restfehler behaftet ist.

## Definition des Strahlstroms und der Strahlleistung

Wie man aus Gleichung (4.2) erkennt, spielt bei der Frage, ob die Eigenfelder des Strahls in den strahldynamischen Simulationen zu berücksichtigen sind, nicht nur die Teilchen-

geschwindigkeit eine Rolle (Faktor  $1/\gamma^2$ ) sondern vor allem die gegebene Strahlintensität (Teilchenstrom  $I$ ). Es muss deshalb zunächst erläutert werden, wie die Größe  $I$  und die damit verbundene Strahlleistung  $P$  in der Beschleunigerphysik definiert werden.

Als „Strahl“ wird die Gesamtheit aller Teilchen mit geringer radialer Abweichung  $\Delta r$  von einem „Sollteilchen“ bezeichnet. Darüber hinaus entstehen in Hochfrequenzbeschleunigern immer longitudinal „gebündelte“ Strahlen („gebunchter“ Strahl = „Bunch“), bei welchem also auch die Abweichungen  $\Delta z$  in Bewegungsrichtung des Strahls klein sind (zum Vergleich Kapitel 2.4).

Der Strahlstrom  $I$  wird daher im Sinne eines elektrischen Stromes als Ladungsmenge  $q$  definiert, welche pro Messdauer  $\Delta t$  einen bestimmten Ort entlang des Beschleunigers passiert. Die Zeitdauer  $\Delta t$  der Messung ist jedoch variabel. Die kleinste Messdauer entspricht der „Bunch-“ bzw. „Mikrobunch-Länge“  $\tau$  (Abbildung 33 a).

Der dazugehörige maximale Strahlstrom  $I_{peak}$  lautet:

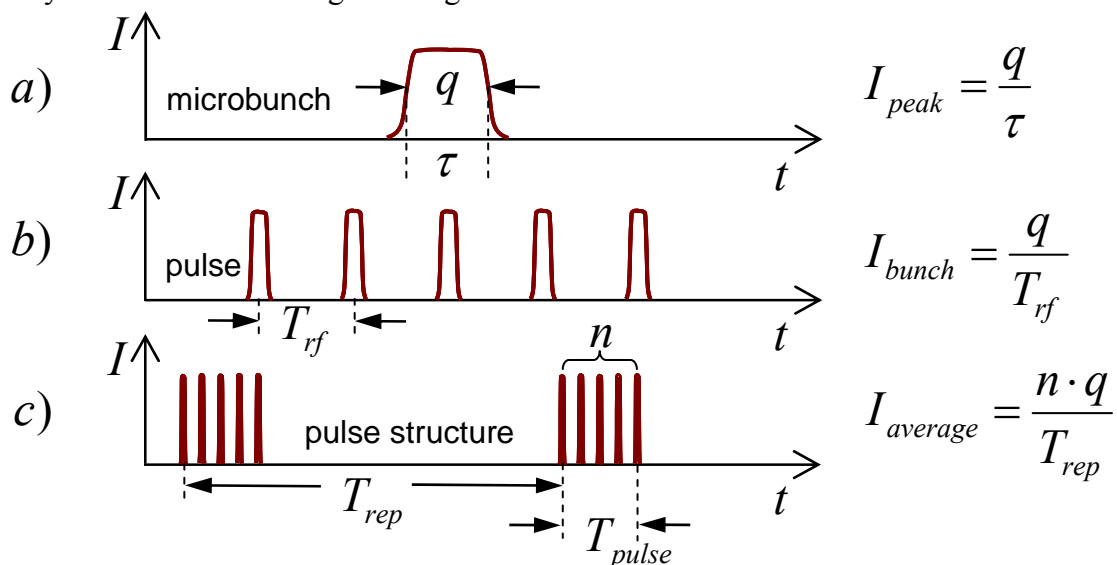
$$I_{peak} = \frac{q}{\tau} \quad (4.3)$$

Allerdings ändert sich die Bunchlänge  $\tau$  permanent entlang des Beschleunigers, so dass es bei der Definition gemäß Gleichung (4.3) Schwankungen des Strahlstroms auch bei konstanter Gesamtladung  $q$  im Microbunch geben kann. Diese Definition ist für strahldynamische Berechnungen daher unbrauchbar, da man zur Berechnung der Raumladungskraft nur die im Microbunch beinhaltete Ladungsmenge  $q$  kennen muss.

Eine eindeutige und bei konstant gehaltener Ladungsmenge (keine Teilchenverluste) ebenfalls konstante Größe ist der Strahl- bzw. Bunchstrom  $I_{bunch}$  (Abbildung 33 b):

$$I_{bunch} = \frac{q}{T_{rf}} = q \cdot f_{rf} \quad (4.4)$$

$I_{bunch}$  ist der mittlere Strom während der Dauer einer HF-Periode  $T_{rf}$  und ist die für strahldynamische Berechnungen einzig relevante Größe.



**Abbildung 33** Definition von Strahlströmen und Zeitstrukturen für den Betrieb eines gepulsten Hochfrequenz-Beschleunigers.

Teilchensimulationsrechnungen für Hochfrequenz-Linearbeschleuniger berücksichtigen in der Regel nur das Verhalten eines einzigen Microbunches entlang des Beschleunigers. Es wird davon ausgegangen, dass sich alle weiteren Microbunches identisch verhalten. Der Einfluss der Raumladungskraft auf benachbarte Microbunches wird meistens vernachlässigt, da dieser in der Regel sehr gering ist.

Mehrere Microbunches (Anzahl  $n$  in Abbildung 33) bilden einen Teilchenpuls der Länge  $T_{pulse}$ . Diese Größe ist für die Hochfrequenzversorgung von Bedeutung. Die Hochfrequenzanlage muss bei einem „gepulsten“ Betrieb eines Beschleunigers nämlich nicht permanent eingeschaltet sein, sondern mindestens während der Zeitdauer  $T_{pulse}$ , in der sich Teilchenpulse in den Beschleunigerkavitäten befinden.

Von einem gepulsten Betrieb spricht man, wenn der Beschleuniger einem bestimmten Zyklus von Beschleunigungs- und Leerlaufzeiten unterliegt. Die Zeit zwischen zwei aufeinander folgenden Pulsen nennt man Wiederholungs- bzw. „Repetitionszeit“  $T_{rep}$ . Damit lässt sich ein mittlerer Strahlstrom  $I_{average}$  (Abbildung 33 c) wie folgt angeben:

$$I_{average} = \frac{n \cdot q}{T_{rep}} = n \cdot q \cdot f_{rep} \quad (4.5)$$

Liefert der Beschleuniger ununterbrochen Strahl, spricht man von einem „Dauerstrich-“ oder CW- (englisch „continuous wave“) Beschleuniger. Dann ist  $n = 1$  und  $T_{rep} = T_{rf}$ , so dass in diesem Fall auch mittlerer und Pulsstrom identisch sind:  $I_{average} = I_{bunch}$ .

Man beachte, dass Dauerstrich-Beschleuniger nicht gleich „Dauerstrahl-Beschleuniger“ bedeutet! Ein Hochfrequenzbeschleuniger liefert immer Strahlpulse mit einer bestimmten Zeitstruktur. Einen kontinuierlichen, d.h. „Dauer-Strahl“, kann nur ein elektrostatischer Beschleuniger wie z.B. vom Van de Graaff-Typ bereitstellen.

Typische Strahlströme nach der Definition aus Gleichung (4.4), bei welchen die Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung nicht mehr vernachlässigbar und folglich in Simulationsrechnungen zu berücksichtigen ist, liegen bei Protonen- und Ionenbeschleunigern etwa zwischen 1 und 100 mA. Natürlich gilt diese Aussage auch für höhere Strahlintensitäten, wobei Intensitäten von mehreren 100 mA technisch schwer realisierbar sind, wegen Einschränkungen auf Seiten der Quellen und im Niederenergiebereich allgemein.

Der Strahlstrom  $I$  ist für den Teilchendynamiker, wie bereits erläutert, der einzig relevante Designparameter. Für den Entwickler der dazugehörigen Beschleunigerkavitäten sind jedoch die maximale sowie die mittlere Strahlleistung, welche vom Beschleunigerzyklus gemäß Abbildung 33 abhängen, ebenso wichtige Designparameter, da diese zum Beispiel die Dimensionierung der HF-Einkopplung in die Kavität oder die benötigte thermische Kühlleistung bestimmen.

Es wird deshalb zunächst das „Tastverhältnis“ (englisch „duty factor“ = DF) als Verhältnis von Pulsdauer zu Zyklusdauer wie folgt definiert:

$$DF [\%] = T_{pulse} \cdot f_{rep} \cdot 100 = \frac{T_{pulse}}{T_{rep}} \cdot 100 \quad (4.6)$$

Das Tastverhältnis gibt also den (zeitlichen) Anteil des verfügbaren Strahls an der gesamten Einschaltzeit eines Beschleunigers an. Der Dauerstrich- (CW-) Betrieb entspricht demnach einem Tastverhältnis von 100%.

Damit lässt sich die mittlere Strahlleistung  $P$  eines Linearbeschleunigers je nach momentaner Energie  $W$  des Strahls am Ort  $Z$  entlang des Beschleunigers wie folgt definieren:

$$P_{average}(z) [MW] = W(z) [GeV] \cdot I [mA] \cdot DF [\%] / 100 \quad (4.7)$$

Typische Parameterbereiche für existierende oder in Planung befindliche Anlagen sind (abhängig von der jeweiligen Anwendung):

- Für die Produktion von Sekundärstrahlen:  
 $W = 0.5$  bis einige  $10 \text{ GeV}$ ,  $P = 0.1 - 5 \text{ MW}$ ,  $DF = 10^{-4} - \text{CW}$ . Dabei besteht die Anlage typischerweise aus einem Linearbeschleuniger mit einer Endenergie  $\leq 1 \text{ GeV}$  (entspricht  $\beta = 0.875$  für Protonen) und eventuell nachfolgendem Einschuss in einen Ringbeschleuniger (Synchrotron).
- Für die Transmutation langlebiger radioaktiver Abfälle sowie für Materialforschung:  
 $W \leq 1 \text{ GeV}$ ,  $P \leq 100 \text{ MW}$ ,  $DF = \text{CW}$ . Für diese Art von Anwendungen wird die Endenergie im Linearbeschleuniger erreicht, d.h. es folgt kein Einschuss in einen Ringbeschleuniger. Dafür werden besondere Anforderungen an den Linearbeschleuniger durch den Dauerstrichbetrieb gestellt (man beachte den hohen Wert für die benötigte Strahlleistung).

Eine der größten Herausforderungen für die obengenannten, meist noch in Planung befindlichen „Multi-Megawatt-Anlagen“, ist die Minimierung der Strahlverluste. Eine Faustformel lautet, dass die lokal deponierte Strahlleistung  $dP_{loss}$  bei Strahlverlusten (z.B. durch Berühren der Apertur) unter  $1 \text{ W/m}$  bleiben muss, damit bei Aktivierung der betroffenen Komponenten eine Wartung noch möglich ist:

$$dP_{loss} / dz < 1 \text{ W/m} \quad (4.8)$$

Am Beispiel des Parametersatzes für den IFMIF – Beschleuniger („International Fusion Materials Irradiation Facility“)[9],[11]:

$$A/q = 2(D^+) \quad ; \quad I = 125 \text{ mA} \quad ; \quad W_{out} = 20 \text{ MeV/u} \quad \Rightarrow \quad P_{out} = 5 \text{ MW}$$

kann der maximal zulässige Verlustanteil am Hochenergieende wie folgt angegeben werden (es wird beispielhaft angenommen, dass lokale Verluste über eine Länge von  $5 \text{ m}$  erfolgen):

$$dz = 5 \text{ m} \quad ; \quad dP_{loss} = (1 \text{ W/m}) \cdot 5 \text{ m} = 5 \text{ W} \quad \Rightarrow \quad \frac{dP_{loss}}{P_{out}} = \frac{5 \text{ W}}{5 \text{ MW}} = 10^{-6}$$

Dieses Zahlenbeispiel führt zu folgenden Schlussfolgerungen bezüglich der Berechnung der Raumladungskraft im Falle von hochintensiven Protonen- und Ionenbeschleunigern:

- Die Anzahl der in der Simulation verwendeten Teilchen muss größer sein als das durch die zulässigen Verlustanteile gesetzte Limit (hier  $> 10^6$ ).
- Die maximal zulässigen Teilchenverlustanteile sind ein weiteres Designkriterium. Um diese genau quantifizieren zu können, muss das Rechenprogramm mit entsprechenden Analysefunktionen ausgestattet werden (vergl. Kapitel 6).

Ferner darf das benutzte Verfahren zur Berechnung der Raumladungskraft, aufgrund der geforderten Genauigkeit bei der Bestimmung von Verlustanteilen von unter  $10^{-6}$ , auf keinen vereinfachenden Annahmen beruhen (z.B. nur lineare Raumladungsanteile  $F_r(r) \sim r$ , Rotationssymmetrie der Ladungsverteilung usw.), falls diese Annahmen nicht in sehr guter Näherung der Wirklichkeit entsprechen.

## 4.2. Simulationsverfahren zur Berechnung der Raumladungskraft

Die Berechnung der Raumladungskraft ist der zeitaufwändigste Teil einer Strahldynamik - Simulationsrechnung (mit typischerweise 60 – 90 % der gesamten Rechenzeit). Es ist dabei trotz der hohen Leistungsfähigkeit moderner Computer unmöglich, alle zu einem realen Bunch gehörenden Teilchen in der Simulation zu verwenden. Es handelt sich nämlich um die Größenordnung  $10^9$  Teilchen pro Bunch, wie an dem Beispiel des IFMIF-Beschleunigers [9] verdeutlicht werden kann:

$$A/q = 2(D^+) \quad ; \quad I = 125 \text{ mA} \quad ; \quad f = 175 \text{ MHz}$$

Nach Gleichung (4.4) befindet sich folgende Ladungsmenge in jedem Microbunch:

$$I_{\text{bunch}} = q \cdot f_{\text{rf}} \quad \Rightarrow \quad q = \frac{0.125 \text{ A}}{175 \cdot 10^6 \text{ Hz}} \approx 7.14 \cdot 10^{-10} \text{ C}$$

Die Anzahl der Teilchen in jedem Microbunch ergibt sich daraus als:

$$n_{\text{bunch}} = \frac{q}{n_q \cdot e} = \frac{7.14 \cdot 10^{-10} \text{ C}}{1 \cdot 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}} \approx 4.46 \cdot 10^9$$

Mit  $N_p$  sei die Anzahl der für die Rechensimulation verwendeten Teilchen bezeichnet. Selbst unter der Annahme, dass die Anzahl der Rechenoperationen zur Bestimmung der Raumladungskraft von der Ordnung  $O(N_p)$  (also linear in  $N_p$ ) ist, können aufgrund der benötigten Rechenleistung maximal  $10^4$ - $10^5$  Simulationsteilchen für Design- und Optimierungsrechnungen verwendet werden (diese haben typischerweise eine Rechendauer von 1 bis 30 Minuten), und bis zu  $10^6$  Simulationsteilchen für Validierungs- und Teilchenverlustrechnungen (bei einer typischen Rechendauer von mehreren Stunden).

Ist der Rechenaufwand von der Ordnung  $O(N_p^2)$ , so können nur noch  $10^3$ - $10^4$  Simulationsteilchen bei akzeptabler Rechenzeit eingesetzt werden (näheres hierzu im Abschnitt 4.3.2).

Die in der Computersimulation verwendeten Teilchen (Anzahl  $N_p$ ) nennt man „Makroteilchen“. Jedes Makroteilchen trägt ein Vielfaches der Ladung eines realen Teilchens:

$$q_{\text{macro}} = \frac{n_{\text{bunch}}}{N_p} \cdot n_A \cdot e \geq 1000 \cdot n_A \cdot e$$

Man kann die  $N_p$  Makroteilchen als Stichprobe aus  $n_{\text{bunch}}$  realen Teilchen eines Microbunches interpretieren, wobei jedes Makroteilchen ein endliches Volumenelement des Phasenraums repräsentiert (vergl. Kapitel 2.4). Es sei daran erinnert, dass die in Kapitel 2.4 eingeführte Phasenraum-Dichteverteilungsfunktion  $f = f(x, x', y, y', z, z'; s)$  eine „geglättete“ Beschreibung der Raumladungskräfte ermöglicht. Da die Dichteverteilungsfunktion aber im Allgemeinen nicht bekannt ist und man stattdessen Makroteilchen verwendet, entsteht dadurch eine „Körnigkeit“ in der Berechnung der Raumladungskräfte (Makroteilchen konzentrieren die gesamte Ladung  $q_{\text{macro}}$  an einen einzigen Ort  $(x, y, z)$ ).

Demzufolge müssen die Methoden zur Berechnung der Raumladungskraft folgende Kriterien erfüllen:

- Sie müssen auf „schnellen“ Algorithmen (möglichst von der Ordnung  $O(N_p)$ ) beruhen, damit man eine möglichst hohe Anzahl  $N_p$  von Makroteilchen einsetzen kann.

- Es müssen entsprechende Interpolationsmethoden zur Berechnung der Eigenfelder am Ort des jeweiligen Makroteilchens entwickelt werden, um den Restfehler aufgrund der „Makroteilchen-Körnigkeit“ zu minimieren.

Die Methoden zur Berechnung der Raumladungsfelder bei Verwendung von Makroteilchen können in folgende zwei Haupttypen aufgeteilt werden [40]:

- Die direkte Berechnung der Eigenfelder am Ort  $r_j$  eines jeden Makroteilchens  $j$  durch Superposition der Beiträge aller restlichen Teilchen  $i \neq j$ .  
Diese wird „**Particle-Particle**“ (PP) Methode genannt.
- Die Berechnung des Eigenfeldes aus dem elektrischen Potential im Ruhesystem des Microbunches durch Lösen der Poisson-Gleichung. Dabei wird ein kartesisches Gitter um die Ladungsverteilung des Bunches definiert und das Potential auf den Gitterpunkten bestimmt. Man nennt dieses Verfahren „**Particle-in-Cell**“ (PIC) Methode, da man die Ladung der Makroteilchen in geeigneter Weise innerhalb der Gitterzellen verteilen muss (z.B. durch Gewichtung benachbarter Gitterpunkte).

#### 4.2.1. Particle-Particle (PP) Methode

Die Particle-Particle (PP) Methode berechnet das selbstinduzierte elektrische Feld  $\vec{E}(\vec{r})$  im Ruhesystem  $\mathbf{K}$  der Ladungsverteilung durch Superposition der Coulombfelder aller Makroteilchen. Zur Unterscheidung der Bezugssysteme werden die Felder und Ortskoordinaten im Ruhesystem der Ladungsverteilung in fetter Schrift und im Laborsystem in kursiver Schrift dargestellt. Es ist:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^{N_p} q_i \frac{\vec{r} - \vec{r}_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^3} \quad (4.9)$$

wobei  $\vec{r}_i$  der Ort des  $i$ -ten Makroteilchens (im Ruhesystem  $\mathbf{K}$ ) mit der Ladung  $q_i$  ist.

Im Ruhesystem des Microbunches ist außerdem  $\vec{B}(\vec{r}) = 0$ .

Um die elektrischen Feldkomponenten gemäß Gleichung (4.9) berechnen zu können, müssen die Ortskoordinaten aller Teilchen aus dem Laborsystem  $k$  mittels Lorentz-Transformation umgerechnet werden. Es wird dabei näherungsweise angenommen, dass sich alle Makroteilchen mit gleicher Geschwindigkeit  $\vec{v}_z$  in  $z$ -Richtung bewegen (also bewegt sich auch das Bezugssystem  $\mathbf{K}$  mit  $\vec{v}_z$  relativ zum Laborsystem  $k$ ).

Die Lorentz-Transformation lautet ([41, 42]):

$$\begin{aligned} \mathbf{X} &= x \\ \mathbf{Y} &= y \\ \mathbf{Z} &= \gamma(z - v_z \cdot t) \\ \mathbf{T} &= \gamma\left(t - \frac{\beta \cdot z}{c}\right) \end{aligned} \quad (4.10)$$

Die transversalen Teilchenkoordinaten bleiben folglich bei der Transformation in das Ruhesystem  $\mathbf{K}$  unverändert. Zur Transformation der longitudinalen Teilchenkoordinaten seien zum Zeitpunkt  $t = 0$  die Ursprünge der Koordinatensysteme  $k$  und  $\mathbf{K}$  deckungsgleich. Aus Gleichung (4.10) erkennt man sofort, dass sich die Longitudinalen Koordinaten der Teilchen mit Index  $i$  wie folgt transformieren:

$$\mathbf{Z}_i = \gamma \cdot z_i \quad (4.11)$$

Im Laborsystem  $k$  erscheint der Strahl folglich longitudinal um den Faktor  $1/\gamma$  verkürzt, was als relativistische Längenkontraktion bekannt ist.

Bei der Transformation der Teilchenkoordinaten in das Ruhesystem  $\mathbf{K}$  des Strahls tritt das Problem auf, dass die Gleichzeitigkeit in  $\mathbf{K}$  zunächst nicht mehr gewährleistet ist: Man erkennt aus Gleichung (4.10) sofort, dass zum Zeitpunkt  $t = 0$  jedem Teilchen  $i$  jeweils eine eigene Zeit  $\mathbf{T}_i = -\gamma \cdot \beta \cdot z_i / c$  entsprechend seinem Abstand  $z_i$  vom Schwerpunkt der Teilchenverteilung zugeordnet wird. Um die Orte aller Teilchen zu einem festen Zeitpunkt  $\mathbf{T} = 0$  zu erhalten, müssen die mit Gleichung (4.11) transformierten longitudinalen Teilchenkoordinaten um den Betrag  $\delta \mathbf{Z}_i$  korrigiert werden:

$$\delta \mathbf{Z}_i = -\mathbf{v}_{z,i} \cdot \mathbf{T}_i = -\mathbf{v}_{z,i} \cdot \gamma \cdot \beta \cdot z_i / c = -\mathbf{v}_{z,i} \cdot \mathbf{Z}_i \cdot v_z / c^2 \quad (4.12)$$

Dabei ist  $\mathbf{v}_{z,i}$  die Geschwindigkeit des Teilchens  $i$  im Ruhesystem  $\mathbf{K}$  und  $v_z$  die bereits eingeführte Geschwindigkeit des Bezugssystems  $\mathbf{K}$  relativ zum Laborsystem  $k$ , d.h. die mittlere Strahlgeschwindigkeit.

Die Größenordnung der notwendigen Ortskorrektur  $\delta \mathbf{Z}_i$  soll anhand eines Beispiels mit  $W = 200 \text{ MeV/u}$  ( $\beta = 0.568$ ,  $\gamma = 1.215$ ) und der Energieverschmierung  $\Delta W / W = 0.02$  abgeschätzt werden. Dieser Energiewert stellt eine Obergrenze für Strahldynamikauslegungen basierend auf H-Mode Kavitäten dar.

Die dazugehörige Geschwindigkeitsunschärfe beträgt im Laborsystem:

$$\frac{\Delta v}{v_z} = \frac{1}{\gamma \cdot (\gamma + 1)} \cdot \frac{\Delta W}{W} \approx 7.434 \cdot 10^{-3}$$

Daraus ergibt sich folgende maximale Teilchengeschwindigkeit  $\mathbf{v}_{z,i}$  im Laborsystem:

$$\mathbf{v}_{z,i} = \beta_z \left( 1 + \frac{\Delta v}{v_z} \right) \cdot c = 0.568 \cdot (1 + 7.434 \cdot 10^{-3}) \cdot c \approx 0.572 \cdot c$$

Diese transformiert sich in das Ruhesystem der Teilchenverteilung nach den Lorentz-Transformationsregeln für Geschwindigkeiten ([41, 42]) wie folgt:

$$\mathbf{v}_{z,i} = \frac{\mathbf{v}_{z,i} - v_z}{1 - \frac{v_z}{c^2} \cdot \mathbf{v}_{z,i}} \approx 0.006 \cdot c$$

Eingesetzt in Gleichung (4.12) erhält man schließlich:

$$\delta \mathbf{Z}_i = -\mathbf{v}_{z,i} \cdot \mathbf{Z}_i \cdot v_z / c^2 = -0.006 \cdot c \cdot \mathbf{Z}_i \cdot 0.572 \cdot c / c^2 = -0.0034 \cdot \mathbf{Z}_i$$

Wie diese Abschätzung zeigt, handelt es sich bei der Koordinatenkorrektur  $\delta \mathbf{Z}_i$  zur Gewährleistung der Gleichzeitigkeit im Ruhesystem der Teilchenverteilung um einen geringfügigen Wert im Promille-Bereich der longitudinalen Teilchenkoordinate  $\mathbf{Z}_i$ , welcher für die im Rahmen der vorliegenden Arbeit relevanten Anwendungen (Teilchenenergien unter  $200 \text{ MeV/u}$ ) nicht weiter berücksichtigt werden muss.

Zur Berechnung der Änderung der Teilchentrajektorien eines jeden Makroteilchens  $i$  aufgrund der Raumladungskräfte werden die aus Gleichung (4.9) gewonnenen Feldkomponenten in die relativistische Bewegungsgleichung eingesetzt [23]:

$$\gamma \cdot m_0 \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} + m_0 \cdot \vec{v} \cdot \frac{d\gamma}{dt} = \vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

Setzt man  $d\gamma/dt \approx 0$  und berücksichtigt, dass im Ruhesystem des Strahls keine Magnetfeldkomponenten auftreten und außerdem  $\gamma_i \approx 1$  ist, so vereinfacht sich die Bewegungsgleichung



wie folgt:

$$m_0 \cdot \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i = q_i \cdot \vec{E}_i \quad (4.13)$$

Dabei ist  $q_i$  die Ladung des Makroteilchens  $i$ ,  $\vec{v}_i$  seine Gesamtgeschwindigkeit und  $\vec{E}_i$  die mit Gleichung (4.9) berechnete elektrische Raumladungs-Feldkomponente am Ort des Teilchens  $i$ .

Mithilfe der Gleichung (4.13) lassen sich die Änderungen der Ortskoordinaten der Teilchen aufgrund der Raumladungskraft wie folgt angeben:

$$\begin{aligned} \Delta X_i &= \frac{1}{2} \cdot \dot{v}_{x,i} \cdot (\Delta T)^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{q_i \cdot E_{x,i}}{m_0} \cdot (\Delta T)^2 \\ \Delta Y_i &= \frac{1}{2} \cdot \frac{q_i \cdot E_{y,i}}{m_0} \cdot (\Delta T)^2 \\ \Delta Z_i &= \frac{1}{2} \cdot \frac{q_i \cdot E_{z,i}}{m_0} \cdot (\Delta T)^2 \end{aligned} \quad (4.14)$$

In den Gleichungen und (4.14) ist die Bestimmung des Zeitschritts  $\Delta T$  noch zu erläutern: Es handelt sich um die Einwirkungszeit der Raumladungskräfte im Inertialsystem der Teilchenverteilung während eines Raumladungsaufwurfes.

Üblicherweise wird jedoch ein Längensegment  $\Delta z$  zwischen zwei aufeinander folgenden Raumladungsaufwürfen im Laborsystem vorgegeben (typisch sind mehrere  $mm$  bis zu mehreren  $cm$ , je nach Teilchengeschwindigkeit). Dabei wird für die Bestimmung der Eigenfelder eine „ballistische“ Bewegung des Microbunches zwischen den Orten  $z$  und  $z + \Delta z$  angenommen, d.h. alle Teilchen behalten ihre Relativkoordinaten vom Ort  $z$  entlang der Strecke  $\Delta z$  bei. Um die Änderungen der Teilchenkoordinaten entlang der Flugstrecke  $\Delta z$  zu berücksichtigen, wird näherungsweise die Teilchenverteilung in der Mitte des Segmentes, also am Ort  $z + \Delta z / 2$  für die Raumladungsberechnung verwendet.

Mit  $\Delta z$  ist ein Zeitschritt  $\Delta t$  im Laborsystem wie folgt verknüpft:  $\Delta z = v_z \cdot \Delta t$ .

Daher muss eine Relation zwischen den Zeitschritten in beiden Bezugssystemen definiert werden. Aus Gleichung (4.10) ergibt sich:

$$\Delta T = \gamma \left( \Delta t - \frac{\beta}{c} \cdot v_z \cdot \Delta t \right) = \gamma \cdot \Delta t \cdot (1 - \beta^2) = \Delta t \cdot \frac{1 - \beta^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} = \Delta t \cdot \sqrt{1 - \beta^2} = \frac{1}{\gamma} \cdot \Delta t \quad (4.15)$$

Eine im Ruhesystem der Teilchenverteilung gemessene Zeit  $\Delta T$  erscheint im Laborsystem um den Faktor  $\gamma$  länger (Zeitdilatation).

Im nächsten Schritt müssen die neuen nach Aufbringen des „Raumladungskicks“ gemäß Gleichung (4.14) resultierenden Ortskoordinaten der Teilchen in das Laborsystem rücktransformiert werden. Dabei bleiben die transversalen Ortskoordinaten erhalten und die longitudinale Koordinate transformiert sich nach Gleichung (4.11) zu  $z_i = Z_i / \gamma$ :

$$\begin{aligned} X_i &= X_{i,old} + \Delta X_i & \rightarrow & x_i = X_i \\ Y_i &= Y_{i,old} + \Delta Y_i & \rightarrow & y_i = Y_i \\ Z_i &= Z_{i,old} + \Delta Z_i & \rightarrow & z_i = Z_i / \gamma \end{aligned} \quad (4.16)$$

Aufgrund der angenommenen ballistischen Bewegung des Strahls zwischen zwei Raumladungsaufwürfen lassen sich die Änderungen der Winkeldivergenzen direkt aus den Änderungen der Ortskoordinaten im Laborsystem angeben, und zwar:

$$\Delta x'_i = \frac{\Delta x_i}{\Delta z}; \quad \Delta y'_i = \frac{\Delta y_i}{\Delta z}; \quad \Delta z'_i = \frac{\Delta z_i}{\Delta z} \quad (4.17)$$

Dabei ist  $\Delta z$  die bereits eingeführte Schrittlänge zwischen zwei Raumladungsaufrufen im Laborsystem und es gilt:  $\Delta x_i = \Delta \mathbf{X}_i$ ;  $\Delta y_i = \Delta \mathbf{Y}_i$ ;  $\Delta z_i = \Delta \mathbf{Z}_i / \gamma$

Die Änderungen der Winkeldivergenzen nach dem Raumladungsaufruf lassen sich somit wie folgt angeben:

$$\begin{aligned} x'_i &= x'_{i,old} + \Delta x'_i \\ y'_i &= y'_{i,old} + \Delta y'_i \\ z'_i &= z'_{i,old} + \Delta z'_i \end{aligned} \quad (4.18)$$

Werden für den longitudinalen Phasenraum die Koordinaten  $(\Delta \varphi_i, \Delta W_i)$  anstelle von  $(z_i, z'_i)$  verwendet, so lassen sich die in den Gleichungen (4.14) bis (4.18) angegebenen Relationen wie folgt umrechnen:

$$\begin{aligned} \Delta z_i &= -\beta_z \lambda \cdot \frac{\Delta \varphi_i}{360^\circ} \\ \Delta z'_i &= \frac{1}{\gamma(\gamma+1)} \frac{\Delta(\Delta W)_i}{W} \end{aligned} \quad (4.19)$$

Obgleich in den nachfolgenden Kapiteln nicht mehr explizit erwähnt, sind alle an der relativistischen Koordinatentransformation geknüpften Rechenschritte allgemein gültig, d.h. sie finden entsprechend auch bei der Berechnung der Eigenfelder des Strahls nach der Particle-in-Cell (PIC) Methode Anwendung.

Die oben beschriebene Particle-Particle Methode ist die rechnerisch einfachste Möglichkeit der Raumladungsberechnung.

Allerdings hat diese Methode verschiedene Nachteile, wie nachfolgend erläutert:

- Die Berechnung der Coulombfelder gemäß Gleichung (4.9) führt zu Singularitäten für  $\vec{r}_j = \vec{r}_i$ , also wenn sich zwei Teilchen ( $i \neq j$ ) am selben Ort befinden. Bereits wenn sich zwei Makroteilchen beliebig nahe kommen, tritt ein künstlicher Streuungseffekt auf, der zusätzlich dadurch verstärkt wird, dass die Makroteilchen ein Vielfaches der Ladung realer Teilchen tragen.

Um dieses Problem zu umgehen, muss ein Mindestabstand  $2 \cdot a$  zwischen den Makroteilchen eingeführt werden. Diese werden dann nicht mehr wie Punktladungen behandelt, sondern wie homogen geladene Kugeln vom Radius  $a$ . Die Größe von  $a$  muss dabei so gewählt werden, dass eine realistische Beziehung zu der tatsächlichen mittleren Entfernung zwischen den Teilchen besteht.

Für Entfernungen  $|\vec{r}_j - \vec{r}_i| \leq a$  wird die abstoßende Wirkung der Coulombkraft um den Faktor  $(r/a)^3$  reduziert:

$$\begin{aligned} \vec{F}_{i,j} &= \frac{q_i \cdot q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{r}{a^3} \cdot \vec{e}_{i,j} \quad \text{für } r \leq a; \\ \vec{F}_{i,j} &= \frac{q_i \cdot q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2} \cdot \vec{e}_{i,j} \quad \text{für } r > a; \\ \text{mit } r &\equiv |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \quad \text{und} \quad \vec{e}_{i,j} = \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \end{aligned} \quad (4.20)$$

- Ein echtes K.o. –Kriterium für die Verwendung der PP-Methode ist der benötigte Rechenaufwand von der Ordnung  $O(N_p^2)$ , wodurch die Anzahl der für die Simulation verwendbaren Makroteilchen stark reduziert wird (maximal  $10^3$ - $10^4$  Teilchen).  
Zwar gibt es die Möglichkeit, die Teilchen wie bei der Particle-in-Cell (PIC) – Methode den Gitterpunkten eines kartesischen Gitters zuzuordnen, um dann die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Gitterpunkten zu berechnen (dieses Verfahren wurde bei der ursprünglichen LORASR-Raumladungsroutine verwendet [17]). In diesem Fall ist der Rechenaufwand von der Ordnung  $O(N_G^2)$ , also von der Anzahl  $N_G$  der Gitterpunkte abhängig. Man kann aber die Anzahl der Rechenoperationen nur dann wesentlich reduzieren, wenn  $N_p \gg N_G$  gilt. Setzt man die Anzahl der Gitterpunkte  $N_G$  zu stark herab, so kommt es zu statistischen Fluktuationen bei der Berechnung der Felder auf dem Gitter. Ein typischer minimaler Wert, der wegen der statistischen Fehler eingehalten werden muss, ist 10 - 100 Makroteilchen pro Gitterzelle im Zentrum des Bunches. Da viele Gitterzellen am Rande keine Ladungen tragen, beträgt die durchschnittliche Besetzungsdichte des Gitters unter 10 Teilchen pro Zelle. Somit kann man bei Verwendung eines kartesischen Gitters die Anzahl der Rechenoperationen typisch um den Faktor  $10^2$  gegenüber der „klassischen“ PP-Methode reduzieren.

Die Ordnung  $O(N_p^2)$  für den Rechenaufwand der PP-Methode kommt dadurch zustande, dass man zwei verschachtelte Rechenschleifen benötigt, um für alle Teilchen  $j=1 \cdot N_p$  die Raumladungskraft  $\vec{F}_j$  aus der Superposition der Beiträge  $\vec{F}_{i,j}$  aller  $i=1 \cdot N_p$  Teilchen mit  $i \neq j$  zu erhalten.

Dies soll mit folgendem Pseudo-Code veranschaulicht werden:

**1.) Raumladungskräfte berechnen ( $O(N_p^2)$ )**

```
for j=1 to Np do
  for i=1 to (Np - 1) do
     $\vec{F}_j = \vec{F}_j + \vec{F}_{i,j}$ 
  next i
next j
```

**2.) Bewegungsgleichung lösen ( $O(N_p)$ )**

```
for j=1 to Np do
```

$$\Delta x_j = \frac{1}{2} \cdot \frac{F_{x,j}}{m_0} \cdot (\Delta T)^2$$

$$\Delta x'_j = \frac{\Delta x_j}{\Delta z}$$

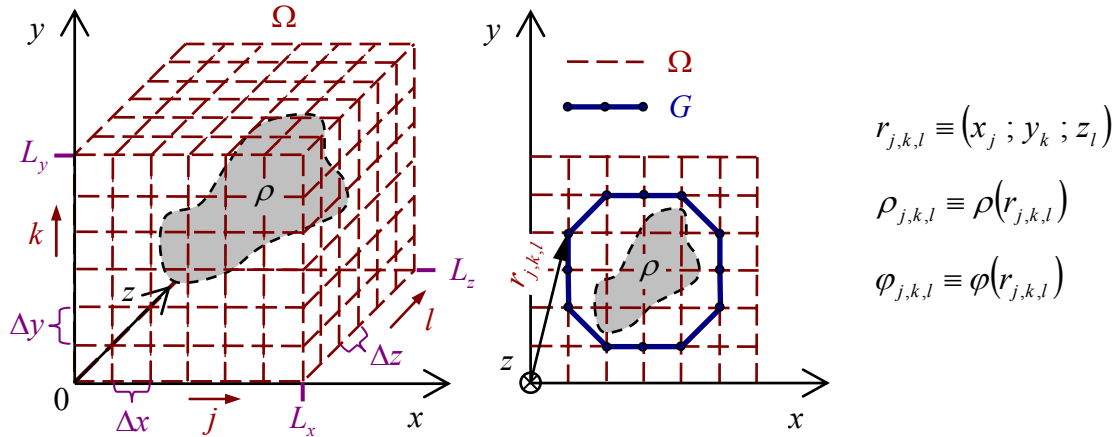
```
next j
```

#### 4.2.2. Particle-in-Cell (PIC) Methode

Im Unterschied zur Particle-Particle (PP) Methode wird bei der Particle-in-Cell (PIC) Methode das Eigenfeld des Strahls nicht mehr direkt aus den Beiträgen aller Makroteilchen berechnet, sondern durch Lösen der Poisson-Gleichung auf den Punkten eines kartesischen Gitters, welches in geeigneter Weise um den Strahl herum definiert werden muss:

$$\Delta\varphi = \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad \text{auf } G \subseteq \Omega \quad (4.21)$$

Dabei wird das Gebiet  $\Omega$  als Quader mit den Kantenlängen  $L_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$  konstruiert, worin sich alle  $N_P$  Makroteilchen befinden:



**Abbildung 34** Definition eines kartesischen Gitters für die Diskretisierung einer gegebenen Ladungsverteilung unter Verwendung verschiedener Randbedingungen.

Die Kantenlängen  $L_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$  sollten in der Regel deutlich größer sein als die entsprechenden RMS-Radien  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  und  $\sigma_z$  (Definition gemäß Gleichung (2.75)) – typischerweise bis zu  $5 \cdot \sigma$ . Einzelne „Halo-Teilchen“ könnten bis an den Rand des Gebietes  $\Omega$  gelangen bzw. das Volumen von  $\Omega$  verlassen. In diesem Fall sollte das Gitter nicht dynamisch vergrößert werden, da sich dann die Mehrzahl der Teilchen innerhalb weniger Gitterzellen im Zentrum befinden würde, was die Genauigkeit der Berechnung stark beeinträchtigt. Stattdessen kann man für die wenigen Randteilchen außerhalb von  $\Omega$  (bis zu 0.1 % aller Makroteilchen) die Raumladungskraft näherungsweise so berechnen, als sei die übrige Ladung im Zentrum des Gitters konzentriert.

Das kartesische Gitter wird benötigt, um allgemeine dreidimensionale Probleme behandeln zu können, zum Beispiel wenn die Ladungsdichteverteilung  $\rho_{j,k,l}$  wie auch das Potential  $\varphi_{j,k,l}$  keine transversale Rotationssymmetrie aufweisen.

Jedoch ist ein rechteckiges Strahlrohr unüblich, so dass es verschiedene Optionen zur Definition der Randbedingungen geben muss. Physikalisch sinnvoll sind folgende Fälle:

- a)  $\varphi = 0$  auf  $\partial\Omega$
  - b)  $\varphi = 0$  auf  $\partial G$
  - c)  $\varphi = 0$  für  $R \rightarrow \infty$
- (4.22)

Der Fall a) bezeichnet Dirichlet'sche Randbedingungen auf dem Rand  $\partial\Omega$  des spatförmigen Gebietes  $\Omega$ . Dieser Fall lässt sich rechentechnisch zum Beispiel unter Verwendung einer Fourier-Reihenentwicklung von  $\rho_{j,k,l}$  und  $\varphi_{j,k,l}$  am einfachsten implementieren.

Der Fall b) ermöglicht die Vorgabe eines beliebig geformten zusammenhängenden Gebietes  $G \subset \Omega$  mit Dirichlet'schen Randbedingungen auf dessen Rand  $\partial G$  (vergl. Abbildung 34).  $G$  kann beispielsweise kreis- oder ellipsenförmig gewählt werden, um die leitende Wand eines Strahlrohres nachzubilden.

Die Fälle a) und b) berücksichtigen also die durch den Strahl induzierten Spiegelladungen, welche  $\varphi = 0$  auf leitenden Oberflächen zur Folge haben.

Es gibt aber auch Fälle, für welche der Strahl als isolierte Ladungsverteilung betrachtet werden muss, z.B. wenn der Abstand zur Resonatorwand sehr groß ist. In diesem Fall spricht man von „offenen Randbedingungen“ (Fall c).

Für die Simulation der Randbedingungen gemäß Fall b) und Fall c) wird zunächst das Gitterpotential  $\varphi_{j,k,l}^0$  im gesamten Gebiet  $\Omega$  mit Dirichlet'schen Randbedingungen auf dem Rand  $\partial\Omega$  berechnet (Fall a) und anschließend werden je nach benötigter Randbedingung Korrekturterme  $\psi_{j,k,l}$  berechnet, welche das gewünschte Potential ergeben:

$$\varphi_{j,k,l} = \varphi_{j,k,l}^0 + \psi_{j,k,l}$$

Die Verfahren zur Bestimmung von  $\psi_{j,k,l}$  sind sehr komplex und erfordern einen hohen Rechenaufwand. Einige dieser Methoden werden im Kapitel 4.2.3 kurz vorgestellt, zusammen mit einer Gegenüberstellung der Besonderheiten von offenen und geschlossenen Randbedingungen.

Nach [40] lassen sich PIC-Algorithmen in folgende Hauptschritte aufteilen:

1. **Diskretisierung**, d.h. geeignete Verteilung der Ladung der Makroteilchen auf die Gitterpunkte, um eine Ladungsdichteverteilung  $\rho_{j,k,l}$  auf dem Gitter zu erhalten.
2. **Lösen der Poisson-Gleichung**  $\Delta\varphi = -\rho/\varepsilon_0$  auf dem Gitter.
3. **Berechnung der elektrischen Feldkomponenten** auf dem Gitter durch Gradientenbildung  $\vec{E} = -\text{grad } \varphi$ .
4. **Interpolation der  $\vec{E}$ -Feldkomponenten** von den Gitterpunkten zu den genauen Orten der Makroteilchen.

Alle obengenannten Berechnungsschritte werden im Ruhesystem  $\mathbf{K}$  der Ladungsverteilung durchgeführt. Hierzu werden die Teilchenkoordinaten mittels einer Lorentz-Transformation in das Ruhesystem des Strahls umgerechnet und anschließend in das Laborsystem  $k$  rücktransformiert, wie bereits im Kapitel 4.2.1 für die Particle-Particle (PP) Methode beschrieben (vergl. Gleichungen (4.10), bis (4.19)).

Nachfolgend werden die vier Hauptschritte eines PIC-Algorithmus näher erläutert. Eine Diskussion möglicher Varianten findet im Kapitel 4.2.3 statt.

Schließlich wird in Kapitel 4.3 die im Rahmen der vorliegenden Arbeit implementierte Raumladungsroutine vorgestellt.

### 1. Diskretisierung der Ladung und Bestimmung von $\rho_{j,k,l}$ auf dem Gitter

Das Ensemble aus  $N_P$  Makroteilchen erzeugt zunächst eine diskrete Ladungsdichteverteilung innerhalb des betrachteten Gebietes  $\Omega$ . Daraus muss eine Ladungsdichteverteilung  $\rho_{j,k,l}$  auf dem Gitter in geeigneter Weise bestimmt werden. Hierzu sind insbesondere folgende Interpolationsmethoden zu erwähnen:

- Die „**Nearest Grid Point**“ (NGP) Methode. Dabei wird die gesamte Ladung eines jeden Makroteilchens dem nächstgelegenen Gitterpunkt zugeordnet. Dies ist die

mathematisch einfachste Zuordnung, die aber statistische Fluktuationen zur Folge haben kann, wenn die Makroteilchenzahl  $N_P$  zu niedrig im Vergleich zur Anzahl  $N_G$  der Gitterpunkte ist. Außerdem ist die Berechnung der Raumladungskraft fehlerbehaftet, da man die Makroteilchen nicht an ihren ursprünglichen Positionen im Raum belässt. Der Fehler wird umso größer, je weniger Makroteilchen verwendet werden und je grober das Gitter ist.

- Die „**Cloud in Cell**“ (CIC) Methode. Dabei wird die Ladung eines jeden Makroteilchens als homogene Wolke innerhalb eines Volumens  $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$  betrachtet. Dieses Volumen entspricht der Größe einer Gitterzelle (vergl. Abbildung 34). Die Ladungswolke wird mit den benachbarten Gitterzellen überlagert und es wird jedem angrenzenden Gitterpunkt so viel Teilladung des Makroteilchens zugewiesen, wie es sich aus den Schnittvolumina ergibt. Diese Methode ermöglicht eine „glattere“ Verteilung der Ladungsdichte auf dem Gitter, bei nur geringfügig höherem Rechenaufwand.

Beide Methoden werden im Kapitel 4.2.3 genauer vorgestellt.

## 2. Lösen der Poisson-Gleichung $\Delta\varphi = -\rho/\varepsilon_0$ auf dem Gitter

Um einen Vorteil gegenüber der PP-Methode bezüglich des Rechenaufwandes (dieser ist bei der PP-Methode von der Ordnung  $O(N_P^2)$ ) zu erzielen, müssen besonders effektive Methoden für die numerische Lösung der Poisson-Gleichung  $\Delta\varphi = -\rho/\varepsilon_0$  auf dem Gitter angewendet werden.

Es gibt vielfältige Möglichkeiten zur numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen. Eine ausführliche Übersicht dieser Methoden sowie eine detaillierte Vorstellung der wichtigsten Algorithmen ist in Kapitel 6 der Referenz [40] zu finden. Dort werden die Methoden wie folgt klassifiziert:

- **Gitter-Relaxationsmethoden** (z.B. **Gauss-Seidel**):

Das zu lösende Problem wird als Gleichungssystem formuliert, also im Falle der Poisson-Gleichung

$$A \cdot \varphi(\vec{r}) = -\rho(\vec{r})/\varepsilon_0$$

wobei  $A$  eine  $(n_x \times n_y \times n_z)$ -Matrix ist. Diese muss so beschaffen sein, dass man sie in zwei Teile  $A = B + R$  trennen kann, wobei die Matrix  $B$  invertierbar sein muss und  $R$  die Matrix des Restterms darstellt (welcher nach jedem Iterationsschritt  $t$  immer kleiner wird).

Man startet mit sinnvollen Anfangsbedingungen  $\varphi^0(\vec{r})$  und nähert sich in  $t$  Iterationsschritten der gewünschten Lösung, indem man zu jedem Iterationsschritt folgendes Gleichungssystem löst:

$$B \cdot \varphi^{(t+1)} = -R \cdot \varphi^{(t)} + \rho \quad t = 0, 1, \dots$$

Dabei nutzt man die Eigenschaft, dass  $B$  invertierbar ist, d.h. man bildet jeweils die inverse Matrix  $B^{-1}$ . Die verschiedenen Verfahren (z.B. Gauss-Seidel, sukzessive Überrelaxation (SOR) usw.) unterscheiden sich im Wesentlichen durch die Definition der Matrix  $B$ .

- **Matrix-Methoden** (z.B. **Sparse Matrix (SM)**, deutsch: dünnbesetzte Matrix):  
Die Matrix-Methoden basieren auf der Finite-Differenzen-Methode, welche das mathematisch einfachste und bekannteste Verfahren zur Lösung von Differenzialgleichungen darstellt. Es wird ebenfalls ein Gleichungssystem

$$A \cdot \varphi(\vec{r}) = -\rho(\vec{r}) / \varepsilon_0$$

aufgestellt, wobei diesmal die Koeffizienten der Matrix  $A$  dadurch bestimmt werden, dass die Ableitungen an den Gitterpunkten durch Differenzen angenähert werden. Die partielle Differentialgleichung (in diesem Fall  $\Delta\varphi = -\rho/\varepsilon_0$ ) wird also in ein Gleichungssystem von Differenzengleichungen umgewandelt.

Um die Lösungen von  $\varphi(\vec{r})$  auf dem Gitter zu erhalten, werden Standardverfahren zur Lösung von Gleichungssystemen, wie zum Beispiel das Gauß'sche Eliminationsverfahren angewandt.

Um die Effizienz dieser Methode zu erhöhen, wurden Algorithmen entwickelt, welche die Tatsache ausnutzen, dass die Matrix  $A$  oft nur dünn besetzt ist, d.h. viele Koeffizienten mit dem Wert 0 hat (Sparse Matrix (SM) Methode).

- **Spektrale Methoden** (z.B. mittels der **Schnellen Fourier Transformation (FFT)**): Unter den Begriffen „spektrale Methode“ oder „spektraler Solver“ fasst man eine ganze Klasse von schnellen Gleichungslösern (englisch „Solver“) zusammen, welche sich besonders gut eignen, partielle Differentialgleichungen numerisch zu lösen.

Diese sind, auch im Vergleich zu den zuvor genannten Methoden, äußerst effizient, d.h. typischerweise von der Ordnung  $O(N \cdot \log_2 N)$ , bei vergleichsweise geringen Näherungsfehlern.

Die letztgenannte spektrale Methode kam als einzige im Rahmen der vorliegenden Arbeiten zur Anwendung und wird deshalb im weiteren Verlauf dieses und der folgenden Kapitel detaillierter beschrieben.

Allgemein ist noch zu bemerken, dass die obengenannten Methoden zur numerischen Lösung der Poisson-Gleichung auf dem Gitter recht unterschiedliche Anforderungen in Bezug auf die Ordnung der Rechenoperationen sowie den Speicherbedarf stellen. Eine entsprechende Gegenüberstellung findet man ebenfalls in Referenz [40]. Man kann aber nicht von einer bevorzugten Methode sprechen, sondern es gibt verschiedene Faktoren zur Festlegung der meistgeeigneten Methode, welche von der Art der Differentialgleichung abhängen. Diese Faktoren sind zum Beispiel:

- Linearität der Differentialgleichung.
- Dimension der Differentialgleichung.
- Trennbarkeit der Variablen.
- usw...

Im Falle der Poisson-Gleichung als lineare partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung mit trennbaren Variablen ist die numerische Lösung mittels einer spektralen Methode, d.h. durch Entwicklung in Fourier-Reihen sowohl für die Ladungsdichteverteilung  $\rho_{j,k,l}$  als auch für das Potential  $\varphi_{j,k,l}$  auf dem Gitter die nächstliegende Alternative. Dies wird auch dadurch deutlich, dass sich das elektrostatische Potential aus der Superposition der Beiträge der einzelnen Quellen bestimmen lässt, was an sich schon „Wellencharakter“ hat.

Ist die Ladungsdichteverteilung  $\rho_{j,k,l}$  auf dem Gitter bekannt (vergl. Schritt 1 – Diskretisierung), so kann diese mittels einer Fourier-Reihe wie folgt angenähert werden (Verwendung der Indizes und der geometrischen Längenbezeichnungen gemäß Abbildung 34):

$$\rho_{j,k,l} = \sum_{m=0}^{n_x-1} \sum_{n=0}^{n_y-1} \sum_{p=0}^{n_z-1} \rho_{m,n,p} \cdot e^{-2\pi i \left( \frac{m \cdot j \cdot \Delta x}{L_x} + \frac{n \cdot k \cdot \Delta y}{L_y} + \frac{p \cdot l \cdot \Delta z}{L_z} \right)} \quad (4.23)$$

Dabei sind  $\rho_{m,n,p}$  die Fourier-Koeffizienten des dualen Gitters und  $n_x, n_y, n_z$  die Gitterzahlen in den 3 Raumrichtungen.

Entsprechend lautet die Fourier-Darstellung des Gitterpotentials wie folgt:

$$\varphi_{j,k,l} = \sum_{m=0}^{n_x-1} \sum_{n=0}^{n_y-1} \sum_{p=0}^{n_z-1} \rho_{m,n,p} \cdot e^{-2\pi i \left( \frac{m \cdot j \cdot \Delta x}{L_x} + \frac{n \cdot k \cdot \Delta y}{L_y} + \frac{p \cdot l \cdot \Delta z}{L_z} \right)} \quad (4.24)$$

Der Ausdruck für  $\varphi_{j,k,l}$  aus Gleichung (4.24) kann in die Poisson-Gleichung (4.21) eingesetzt werden, mit folgendem Ergebnis:

$$\begin{aligned} \Delta \varphi_{j,k,l} &= -4\pi^2 \sum_m \sum_n \sum_p \left( \frac{m^2}{L_x^2} + \frac{n^2}{L_y^2} + \frac{p^2}{L_z^2} \right) \rho_{m,n,p} \cdot e^{-2\pi i \left( \frac{m \cdot x_j}{L_x} + \frac{n \cdot y_k}{L_y} + \frac{p \cdot z_l}{L_z} \right)} \\ &= -4\pi^2 \left( \frac{m^2}{L_x^2} + \frac{n^2}{L_y^2} + \frac{p^2}{L_z^2} \right) \varphi_{j,k,l} = -\frac{\rho_{j,k,l}}{\epsilon_0} \end{aligned} \quad (4.25)$$

Setzt man nun in die Gleichung (4.25) die Ausdrücke für  $\rho_{j,k,l}$  und  $\varphi_{j,k,l}$  aus den Gleichungen (4.23) und (4.24) ein, so erhält man durch Vergleich der Koeffizienten:

$$4\pi^2 \left( \frac{m^2}{L_x^2} + \frac{n^2}{L_y^2} + \frac{p^2}{L_z^2} \right) \rho_{m,n,p} = \frac{\rho_{m,n,p}}{\epsilon_0}$$

oder

$$\rho_{m,n,p} = \frac{\rho_{m,n,p}}{\epsilon_0 4\pi^2 \left( \frac{m^2}{L_x^2} + \frac{n^2}{L_y^2} + \frac{p^2}{L_z^2} \right)} \quad (4.26)$$

Da man mit Gleichung (4.26) eine Beziehung zwischen den Fourier-Koeffizienten des dualen Gitters und somit eine Verknüpfung zwischen der Ladungsdichteverteilung und dem Potential auf dem Gitter gefunden hat, lässt sich das Gitterpotential bei bekannter Ladungsdichteverteilung auf folgendem Umweg bestimmen:

$$\rho_{j,k,l} \xrightarrow{(4.17)} \rho_{m,n,p} \xrightarrow{(4.20)} \varphi_{m,n,p} \xrightarrow{(4.18)} \varphi_{j,k,l}$$

Dabei könnte man die Zwischenschritte  $\rho_{j,k,l} \xrightarrow{(4.17)} \rho_{m,n,p}$  sowie  $\varphi_{m,n,p} \xrightarrow{(4.18)} \varphi_{j,k,l}$  direkt berechnen. Der Rechenaufwand wäre jedoch von der Ordnung  $O(N_G^2)$ , da man  $N_G = n_x \cdot n_y \cdot n_z$  Gleichungen (Anzahl der Stützpunkte für die Fourier-Entwicklung = Anzahl der Gitterpunkte) zur Bestimmung aller Koeffizienten benötigt, und jede dieser Gleichungen aus  $N_G$  Summanden (=Schleifendurchgängen) besteht.

Eine viel effektivere Lösung bietet daher die Verwendung der „**Schnellen Fourier-Transformation**“ (englisch „**Fast Fourier Transform**“, **FFT**).

Die FFT [43],[44],[45] ist ein rekursiver Algorithmus, welcher die Koeffizienten der diskreten Fourier-Transformation (DFT) sowie der inversen DFT näherungsweise berechnet. Dabei wird jeweils eine DFT von der zusammengesetzten Größe  $N = n_1 \cdot n_2$  in zwei kleinere DFTs der Größen  $n_1$  und  $n_2$  aufgeteilt. Dadurch wird die Anzahl der arithmetischen Operationen von der Ordnung  $O(N^2)$  auf die Ordnung  $O(N \cdot \log_2 N)$  reduziert („Cooley-Tukey Algorithmus“, 1965, [45]), mit drastischen Konsequenzen für die benötigte Rechenzeit.



Als nachteilige Einschränkung muss erwähnt werden, dass die Anzahl  $N$  der (äquidistanten) Stützpunkte die Bedingung  $N = 2^l$  erfüllen muss. Damit ist die Anzahl  $N_G$  der Gitterpunkte des kartesischen Gitters auf 2'er Potenzen beschränkt, also z.B.  $N_G = 64 \times 64 \times 64$ ;  $N_G = 128 \times 128 \times 128$ ;  $N_G = 256 \times 256 \times 256$  usw., und kann nicht beliebig angepasst werden. Auf die FFT wird ebenfalls detaillierter im Kapitel 4.3 eingegangen.

### 3. Berechnung der elektrischen Feldkomponenten auf dem Gitter durch Gradientenbildung $\vec{E} = -\text{grad } \varphi$

Das elektrische Feld  $\vec{E}$  kann durch Gradientenbildung wie folgt abgeleitet werden:

$$\vec{E} = -\text{grad}\varphi = -\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\vec{e}_x + \frac{\partial\varphi}{\partial y}\vec{e}_y + \frac{\partial\varphi}{\partial z}\vec{e}_z\right) \quad (4.27)$$

Da diese Operation auf dem kartesischen Gitter mit den Gitterabständen  $\Delta x; \Delta y; \Delta z$  erfolgt, werden die Komponenten von  $\vec{E}$  durch Bildung der symmetrischen Differenzenquotienten berechnet:

$$\begin{aligned} E_x(x_j; y_k; z_l) &= -\frac{\varphi_{j+1,k,l} - \varphi_{j-1,k,l}}{2 \cdot \Delta x} \\ E_y(x_j; y_k; z_l) &= -\frac{\varphi_{j,k+1,l} - \varphi_{j,k-1,l}}{2 \cdot \Delta y} \\ E_z(x_j; y_k; z_l) &= -\frac{\varphi_{j,k,l+1} - \varphi_{j,k,l-1}}{2 \cdot \Delta z} \end{aligned} \quad (4.28)$$

### 4. Interpolation der $\vec{E}$ -Feldkomponenten von den Gitterpunkten zu den genauen Orten der Makroteilchen

Anschließend müssen die  $\vec{E}$ -Felder von den Gitterpunkten zu den genauen Orten eines jeden Makroteilchens  $i$  interpoliert werden. Hierfür kann zum Beispiel eine multilineare Interpolation durchgeführt werden, gemäß folgender Rechenvorschrift:

$$\begin{aligned} E_x(x_j + \delta x; y_k + \delta y; z_l + \delta z) &= E(x_j; y_k; z_l) + \frac{E(x_{j+1}; y_k; z_l) - E(x_j; y_k; z_l)}{\Delta x} \cdot \delta x + \\ &+ \frac{E(x_j; y_{k+1}; z_l) - E(x_j; y_k; z_l)}{\Delta y} \cdot \delta y + \frac{E(x_j; y_k; z_{l+1}) - E(x_j; y_k; z_l)}{\Delta z} \cdot \delta z \end{aligned} \quad (4.29)$$

$E_y$  und  $E_z$  analog

Dabei sind  $(x_j + \delta x; y_k + \delta y; z_l + \delta z)$  die exakten Raumkoordinaten des jeweiligen Makroteilchens.

Der Rechenaufwand der PIC-Methode ist von der Ordnung  $O(\alpha \cdot N_P + \beta(N_G))$ , wobei  $N_P$  die Anzahl der Makroteilchen und  $N_G$  die Anzahl der Gitterpunkte ist. Die Konstante  $\alpha$  sowie die Funktion  $\beta$  hängen von der Wahl der Methode zur Lösung der Poisson-Gleichung auf dem Gitter ab [40] (Hauptschritt 2 des PIC-Algorithmus). Im Falle der spektralen Methode unter Verwendung der Schnellen Fourier Transformation (FFT) beträgt die Ordnung des Rechenaufwandes  $O(N_G \cdot \log_2 N_G)$  ([40],[43],[45]). Darin besteht der wesentliche Vorteil gegenüber der PP-Methode, welche von der Ordnung  $O(N_P^2)$  ist.

Die Hauptschritte 1,3 und 4 des PIC-Algorithmus sind von der Ordnung  $O(N_P)$ ,  $O(N_G)$  oder  $O(N_P) + O(N_G)$ , hängen also im Wesentlichen linear von  $N_P$  und  $N_G$  ab.

Folgender Pseudo-Code veranschaulicht die Situation am Beispiel des im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelten Algorithmus:

### 1.) Diskretisierung der Ladung und Bestimmung von

$\rho_{j,k,l}$  auf dem Gitter ( $O(N_P) + O(N_G)$ )

for i=1 to  $N_P$  do

Ordne jedem Teilchen i einen Gitterpunkt  $\vec{r}_{j,k,l}$  zu.

next i

for j=1 to  $n_x$  do

for k=1 to  $n_y$  do

for l=1 to  $n_z$  do

Berechne die Raumladungsdichte  $\rho_{j,k,l} = f(Q_{bunch})$ .

next l

next k

next j

### 2.) Lösen der Poisson-Gleichung ( $O(N_G \cdot \log_2 N_G)$ )

for j=1 to  $n_x$  do

for k=1 to  $n_y$  do

for l=1 to  $n_z$  do

Berechne die Fourier-Koeffizienten  $\rho_{m,n,p}$  des dualen

Gitters mittels einer FFT:  $\rho_{j,k,l} \xrightarrow{(4.17)} \rho_{m,n,p}$

next l

next k

next j

Wiederhole die obige Schleife für folgende Berechnungen:

- Berechne die Fourier-Koeffizienten  $\varphi_{m,n,p}$  des

Gitterpotentials:  $\rho_{m,n,p} \xrightarrow{(4.20)} \varphi_{m,n,p}$

- Berechne das Gitterpotential durch Anwendung

einer inversen FFT:  $\varphi_{m,n,p} \xrightarrow{(4.18)} \varphi_{j,k,l}$

### 3.) Berechnung des $\vec{E}$ -Feldes auf dem Gitter ( $O(N_G)$ )

for j=1 to  $n_x$  do

for k=1 to  $n_y$  do

for l=1 to  $n_z$  do

$$\vec{E}(x_j; y_k; z_l) = -\left( \frac{\varphi_{j+1,k,l} - \varphi_{j-1,k,l}}{2 \cdot \Delta x}, \frac{\varphi_{j,k+1,l} - \varphi_{j,k-1,l}}{2 \cdot \Delta y}, \frac{\varphi_{j,k,l+1} - \varphi_{j,k,l-1}}{2 \cdot \Delta z} \right)$$

next l

next k

next j

#### 4.) Interpolation des $\vec{E}$ -Feldes zum Ort

$\vec{r}(i) = (x_j + \delta x; y_k + \delta y; z_l + \delta z)$  des Teilchens i ( $O(N_p)$ )  
for i=1 to  $N_p$  do  
    Berechne  $\vec{E}(x_j + \delta x; y_k + \delta y; z_l + \delta z)$  mit Gleichung (4.29).  
next i

#### 5.) Lösen der Bewegungsgleichung ( $O(N_p)$ ) (siehe PP-Methode)

for i=1 to  $N_p$  do  
$$\Delta x_j = \frac{1}{2} \cdot \frac{F_{x,j}}{m_0} \cdot (\Delta T)^2$$
$$\Delta x'_j = \frac{\Delta x_j}{\Delta z}$$
  
next i

#### 4.2.3. Diskussion möglicher Varianten der PIC Methode

Nachfolgend werden einige bereits erwähnte Aspekte beziehungsweise Lösungsoptionen für PIC-Algorithmen näher erläutert. Diese sind:

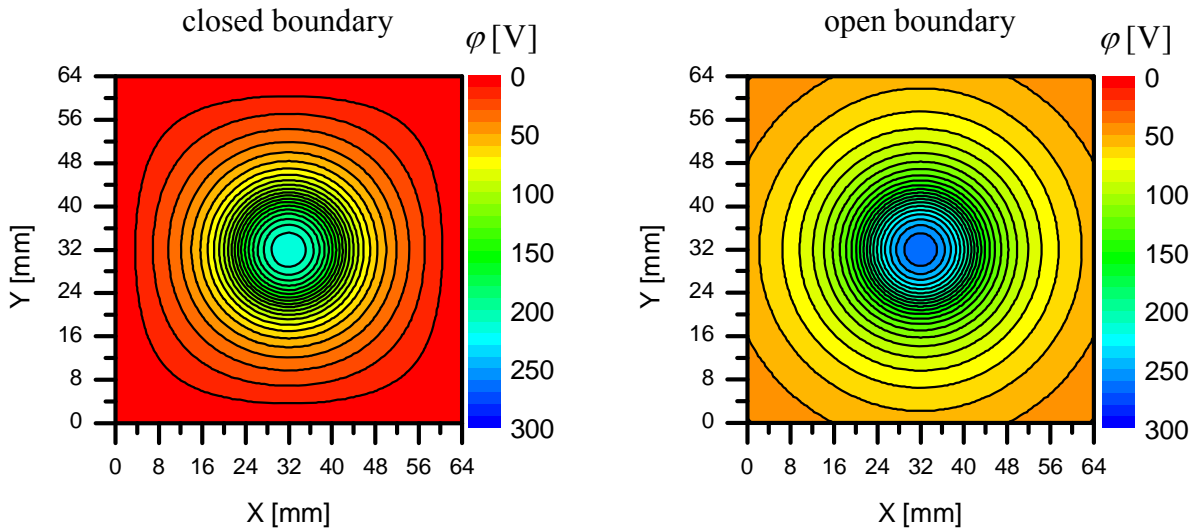
- Eine Diskussion möglicher Randbedingungen (offen gegenüber geschlossen).
- Zwei Varianten zur Bestimmung der Ladungsdichteverteilung auf dem Gitter (NGP gegenüber CIC).
- Begriffserklärung und Beispiele zur Schnellen Fourier Transformation (FFT).

#### Gegenüberstellung von offenen und geschlossenen Randbedingungen

Die wesentlichen Unterschiede bei der Verwendung offener beziehungsweise geschlossener Randbedingungen werden anhand eines konkreten Beispiels in Abbildung 35 sowie in Abbildung 36 illustriert.

Als Teststrahl wurde eine homogen geladene Kugel mit 20 mm Durchmesser verwendet, welche sich im Falle geschlossener Randbedingungen in einem quaderförmigen Gebiet  $\Omega$  mit den Kantenlängen  $L_x = L_y = L_z = 64$  mm und  $\varphi = 0$  auf dem Rand  $\partial\Omega$  befindet. Fasst man die transversalen Kantenlängen  $L_x$  und  $L_y$  als Innendurchmesser eines Strahlrohres auf, so beträgt in diesem Fall der Füllfaktor, d.h. der vom Strahl eingenommene Anteil der Apertur etwas über 30%. Dieser Wert ist typisch für viele Strahldynamik-Designs, kann aber im Bereich von Driftröhren oder Quadrupollinsen manchmal auch 50-70% betragen.

Für die Berechnung der Potential- und Feldverläufe auf dem Gitter wurde im Falle geschlossener Randbedingungen die im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelte 3D PIC-FFT Routine verwendet. Der Fall offener Randbedingungen wurde mit den analytischen Ausdrücken für  $\varphi(r)$  und  $\vec{E}_r(r)$  berechnet, welche für diese einfache Ladungsdichteverteilung bekannt sind. Um die Fälle miteinander vergleichen zu können, wurden alle Werte nur auf den Gitterpunkten berechnet, wobei ein Gitter mit  $N_G = 128 \times 128 \times 128$  Punkten verwendet wurde.  $\vec{E}(x_j; y_k; z_l)$  wurde ebenfalls auf dem Gitter durch Bildung der Differenzenquotienten gemäß Gleichung (4.28) bestimmt.



**Abbildung 35** Verlauf der Äquipotentiallinien  $\varphi(X; Y; Z)$  (in Volt) in der Schnittebene  $Z = L_z/2$  bei offenen sowie bei geschlossenen Randbedingungen. Betrachtet wurde eine homogen geladene Kugel vom Radius  $R = 10$  mm, im Zentrum eines Quaders  $\Omega$  mit den Kantenlängen  $L_x = L_y = L_z = 64$  mm, bei einem Strahlstrom  $I_{bunch}$  von 70 mA und der Frequenz 352.21 MHz (vergl. Gleichung (4.4)). Im Falle geschlossener Randbedingungen ist  $\varphi = 0$  auf dem Rand  $\partial\Omega$  des Quaders.

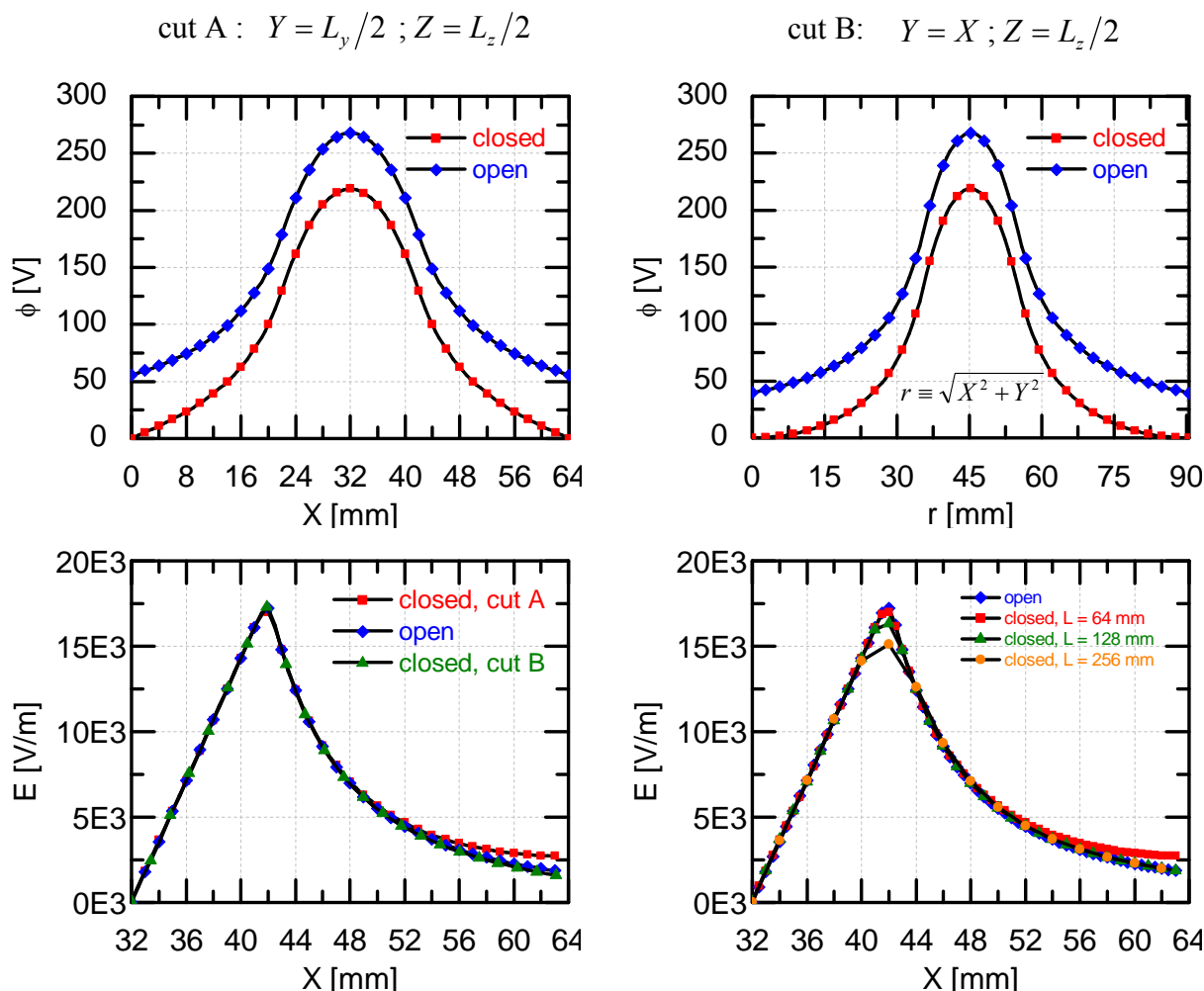
Die wesentlichen Unterschiede sind wie folgt:

- Bei Verwendung Dirichlet'scher Randbedingungen auf dem Rand  $\partial\Omega$  des Quaders geht die Rotationssymmetrie verloren, d.h. die Äquipotentiallinien in den Schnittebenen X-Y, X-Z und Y-Z sind nicht mehr kreis- bzw. ellipsenförmig (Abbildung 35 links), obwohl dies bei einer homogen gefüllten Kugel offensichtlich der Fall sein müsste. Die Abweichungen von der erwarteten Rotationssymmetrie sind besonders stark ausgeprägt auf den Diagonalen  $X = Y$ ,  $X = Z$  und  $Y = Z$  und nehmen mit steigendem Abstand  $r$  vom Zentrum des Quaders zu.
- Die absoluten Werte der Potentiale  $\varphi(X; Y; Z)$  unterscheiden sich für offene bzw. geschlossene Randbedingungen im gesamten Gebiet  $\Omega$  deutlich (vergl. insbesondere Abbildung 36 oben). Dabei ist bei offenen Randbedingungen  $\varphi > 0$  auf dem Rand  $\partial\Omega$  (Abbildung 35 rechts).
- Trotz der deutlichen Unterschiede bei den Potentialwerten lassen sich ihre Ableitungen, also z.B. die Feldverläufe  $E_x(x; L_y/2; L_z/2)$  und  $E_r(x; y; L_z/2)$  recht gut vergleichen (Abbildung 36 unten).

Es bestehen jedoch weiterhin folgende Probleme:

- Bei geschlossenen Randbedingungen hängt der errechnete Verlauf von  $\vec{E}_r$  davon ab, welcher Pfad gewählt wird (z.B. Schnitt A oder Schnitt B, Abbildung 36). Die Rotationssymmetrie geht also, wie bereits diskutiert, selbst bei rotationssymmetrischen Strahlen verloren. Es wird alleine durch die Wahl der Randbedingungen eine „künstliche“ Quadrupolkomponente der Eigenfelder des Strahls eingeführt, welche diesen leicht verformt.
- Der errechnete Verlauf von  $\vec{E}_r$  ist ferner abhängig von der Wahl der Größe der Kantenlängen  $L_x$ ,  $L_y$  und  $L_z$  (vergl. Abbildung 36 unten rechts). Bei dem

gezeigten Beispiel kommt es für die kurze Kantenlänge ( $L = 64$  mm) zu einer sehr guten Übereinstimmung mit der Lösung für offene Randbedingungen im „Nahfeld“, also am Ort der Ladungsverteilung, während es im „Fernfeld“ sichtbare Abweichungen gibt. Für  $L = 128$  mm und  $256$  mm ist die Situation genau umgekehrt.



**Abbildung 36** Verlauf der Äquipotentiallinien  $\phi$  sowie der elektrischen Feldlinien  $\vec{E}$  für das Beispiel aus Abbildung 35 in den Schnittebenen  $Y = L_y/2$  ,  $Z = L_z/2$  (Schnitt A) sowie  $Y = X$  ,  $Z = L_z/2$  (Schnitt B). Für Schnitt A wird zusätzlich der Verlauf der  $E_x$  -Komponente bei Variation der Kantenlängen des Quaders  $\Omega$  mit Dirichlet'schen Randbedingungen dargestellt ( $L_x = L_y = L_z = 64 ; 128 ; 256$  mm).

Für die Wahl und räumliche Definition der Randbedingungen ergeben sich aus der obigen Diskussion folgende Konsequenzen:

- Die Wahl Dirichlet'scher Randbedingungen ist physikalisch sinnvoll, da sich auch in Wirklichkeit Spiegelladungen auf leitenden Oberflächen im Beschleuniger (Strahlrohr) bilden, welche das Eigenpotential des Strahls entsprechend absenken. Die Variation der  $\vec{E}$  -Feldkomponenten bei Änderung der Kantenlängen  $L_x$  ,  $L_y$  und  $L_z$  , wie in Abbildung 36 unten rechts beobachtet, führt nur scheinbar zu willkürlichen Ergebnissen: In Wirklichkeit sind  $L_x$  und  $L_y$  fest vorgegeben, entsprechend der

tatsächlichen Strahlrohraperturen, womit der physikalisch sinnvolle Verlauf von  $\vec{E}_r(r)$  eindeutig festgelegt wird. Die Wahl der Randbedingung in longitudinaler Richtung bleibt jedoch willkürlich. Oft wird  $L_z = L_p$  gesetzt, wobei  $L_p$  die Periodenlänge der Beschleunigerstruktur ist, also  $L_p = \beta\lambda$  oder  $L_p = \beta\lambda/2$ .

- Es bleibt jedoch das Problem, dass bei Verwendung kartesischer Koordinaten mit  $\varphi > 0$  auf dem Rand  $\partial\Omega$  einer spatförmigen Gitterbox das errechnete  $\vec{E}(r)$ -Feld die bereits diskutierte, fehlerhafte Quadrupol-Komponente besitzt. Um dieses Problem zu umgehen, muss das im vorherigen Kapitel vorgestellte spektrale PIC-Verfahren dahingehend erweitert werden, dass beliebig geformte Gebiete  $G \subseteq \Omega$  mit  $\varphi = 0$  auf dem Rand  $\partial G$  (vergl. Abbildung 34) definiert werden können. Ein hierfür entwickeltes Verfahren basierend auf einer Faltungsmethode (englisch: „convolution method“) wird anschließend prinzipiell erläutert.
- Offene Randbedingungen sind nur dann physikalisch sinnvoll, wenn die Ladungsverteilung auch tatsächlich als isoliert betrachtet werden kann, also wenn alle leitenden Oberflächen entlang der Strahlführung hinreichend weit vom Strahl entfernt sind. Im Übrigen simuliert die im Kapitel 4.2.1 vorgestellte Particle-Particle (PP) – Methode ebenfalls offene Randbedingungen, da sie lediglich die direkten Coulombfelder zwischen den Makroteilchen des Strahls durch Superposition berücksichtigt, aber keine Spiegelladungen.

Bei der PIC-Methode ist die Simulation offener Randbedingungen wesentlich komplizierter, da die spektrale Methode zunächst vom Ansatz  $\varphi = 0$  auf dem Rand  $\partial\Omega$  des kartesischen Gitters ausgeht. Um dennoch offene Randbedingungen (d.h.  $\varphi = 0$  für  $R \rightarrow \infty$ ) zu erfüllen, sind mindestens zwei Iterationsschritte notwendig: Zunächst wird das Potential  $\varphi_{j,k,l}^0$  innerhalb des Gebietes  $\Omega$  mit  $\varphi = 0$  auf dem Rand  $\partial\Omega$  berechnet, wie im Kapitel 4.2.2 beschrieben. In einem weiteren Rechenschritt werden dann Korrekturterme  $\psi_{j,k,l}$  berechnet, welche sich aus einer zweiten Randbedingung ergeben, und zwar:  $\varphi = 0$  auf dem Rand  $\partial\Omega_1$  eines erweiterten kartesischen Gitters  $\Omega_1 \supset \Omega$ . Das gesuchte Potential mit  $\varphi > 0$  auf dem Rand  $\partial\Omega$  und  $\varphi = 0$  für  $R \rightarrow \infty$  ergibt sich aus der Superposition der Ergebnisse beider Iterationsschritte  $\varphi_{j,k,l} = \varphi_{j,k,l}^0 + \psi_{j,k,l}$  („James Algorithmus“, wird ebenfalls noch prinzipiell erläutert).

#### *Simulation Dirichlet'scher Randbedingungen auf beliebig geformten (z.B. kreisförmigen) Gebieten*

Das nachfolgend vorgestellte Verfahren ist nur eine von verschiedenen Möglichkeiten, beliebig geformte Gebiete  $G$  mit Dirichlet'schen Randbedingungen auf ihrem Rand  $\partial G$  für einen spektralen Poisson-Solver zu implementieren, und wird detailliert in folgenden Referenzen beschrieben: [46], [47], [48].

Es soll an dieser Stelle nur beispielhaft vorgestellt werden, da es im Rahmen der vorliegenden Arbeit zwar nicht zur Anwendung kam, jedoch eine zukünftige Erweiterungsoption für den entwickelten PIC-Algorithmus darstellen könnte.

Zunächst bedarf es eines Exkurses in die Grundidee und Anwendung Green'scher Funktionen. Die Green'sche Methode ist ein nützliches Hilfsmittel zur Lösung linearer partieller Differentialgleichungen[43],[49]. Für die Poisson-Gleichung (Gleichung (4.21))

bedeutet es, dass man diese nicht explizit lösen muss, sondern es genügt die Greensfunktion des Laplace-Operators zu kennen.

Im Falle einer Punktladung kann man die Greensfunktion durch folgende elementare Überlegungen herleiten:

Das Coulomb-Potential einer Punktladung ist bekannt, und zwar:

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (4.30)$$

Dabei ist  $\vec{r}'$  der Ort der Quelle (hier Punktladung  $Q$ ) und  $\vec{r}$  der Ortsvektor für die Bestimmung des Coulomb-Potentials.

Die Poisson-Gleichung einer beliebigen Ladungsdichteverteilung  $\rho(\vec{r})$  besagt:

$$\Delta \varphi(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon_0} \quad (4.31)$$

Für eine Punktladung besteht die Ladungsdichte  $\rho$  aus der Gesamtladung  $Q$  am Ort  $\vec{r}'$ , d.h. es kann formal geschrieben werden:

$$\rho(\vec{r}) = Q \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.32)$$

wobei  $\delta$  die Diracsche Deltafunktion ist.

Setzt man nun  $\varphi(\vec{r})$  aus Gleichung (4.30) in die rechte Seite von Gleichung (4.31) sowie den Ausdruck für  $\rho(\vec{r})$  aus Gleichung (4.32) in die linke Seite von Gleichung (4.31) ein, so erhält man:

$$\Delta \left( \frac{1}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) = -\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.33)$$

Darin sind folgende Aussagen enthalten:

a.)  $\frac{1}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|}$  ist der Ausdruck für die Greensche Funktion des Laplace-Operators  $\Delta$  (vergl. auch [49]):

$$G_{\Delta}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (4.34)$$

b.) Es gilt (im Übrigen allgemein, d.h. für jede Greensfunktion):

$$\Delta G(\vec{r}, \vec{r}') = -\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.35)$$

Für die Lösung der Poisson-Gleichung hat der soeben vorgeführte Greensche Formalismus eine außerordentliche Bedeutung. Kennt man nämlich die Greensfunktion  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  des

Differentialoperators  $\Delta = \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$ , so kann eine Lösung der Poisson-Gleichung wie folgt angegeben werden [49]:

$$\varphi(\vec{r}) = \int_{\Omega} G(\vec{r}, \vec{r}') \cdot f(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (4.36)$$

wie sich für  $f(\vec{r}') = \rho(\vec{r}')/\epsilon_0$  leicht überprüfen lässt:

$$\Delta \varphi(\vec{r}) = \frac{1}{\epsilon_0} \int_{\Omega} \Delta G(\vec{r}, \vec{r}') \cdot \rho(\vec{r}') d\vec{r}' \stackrel{4.25}{=} -\frac{1}{\epsilon_0} \int_{\Omega} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \rho(\vec{r}') d\vec{r}' = -\frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon_0}$$

Formal kann Gleichung (4.36) mit dem Faltungsoperator beschrieben werden:

$$\varphi(\vec{r}) = (f * G)(\vec{r}) = \int_{\Omega} G(\vec{r}, \vec{r}') \cdot f(\vec{r}') d\vec{r}' \quad \Leftrightarrow \quad \varphi = f * G$$

Daher wird ein solches Verfahren unter Verwendung der Greensfunktion als Faltungsmethode (englisch: „convolution method“) bezeichnet.

Da es sich bei der Poisson-Gleichung um eine homogene Differentialgleichung handelt, gilt das Superpositionsprinzip, d.h. Gleichung (4.36) kann für jede beliebige Teilchenverteilung verwendet werden. Die Lösung  $\varphi(\vec{r})$  ergibt sich aus der Superposition der Beiträge der einzelnen Quellen an den Orten  $\vec{r}'$ :

$$\varphi(\vec{r}) = \alpha_1 \cdot \varphi_1(\vec{r}) + \alpha_2 \cdot \varphi_2(\vec{r}) + \dots + \alpha_{N_p} \cdot \varphi_{N_p}(\vec{r})$$

Da man die Poisson-Gleichung auf dem Gitter lösen möchte, d.h. es liegen diskrete Funktionen vor, ist die Faltung ebenfalls diskret:

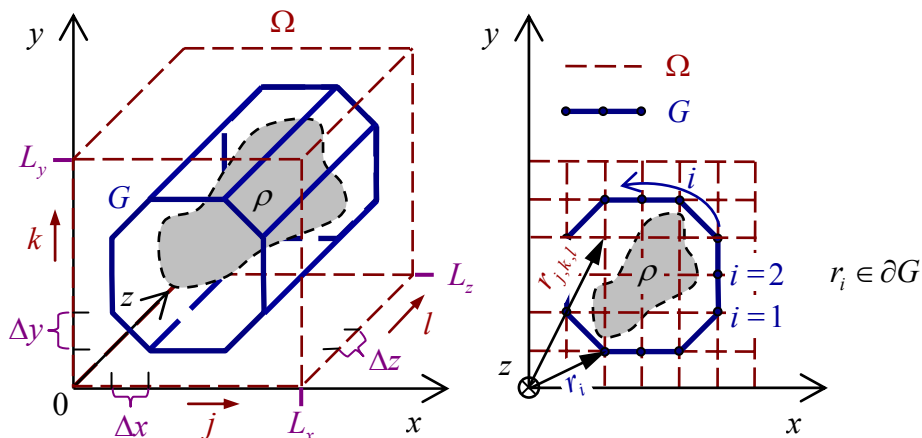
$$\varphi(r_{j,k,l}) = (f * G)(r_{j,k,l}) = \sum_{j',k',l'} G_{j-j',k-k',l-l'} \cdot f_{j',k',l'} \quad (4.37)$$

Dabei bezeichnen die Indizes  $j',k',l'$  die Orte der Quellen (Makroteilchen) auf dem Gitter.

Zurück von der Vorstellung des Greens-Formalismus zu dem vorliegenden Problem, nämlich der Simulation Dirichlet'scher Randbedingungen auf beliebig geformten Gebieten, kann das hier vorgestellte Verfahren in folgende Hauptschritte eingeteilt werden:

- Zunächst wird die Poisson-Gleichung  $\Delta\varphi_0 = -\rho/\varepsilon_0$  mit  $\varphi_0 = 0$  auf dem Rand  $\partial\Omega$  des quaderförmigen Gebietes  $\Omega$ , wie im Kapitel 4.2.2 beschrieben, gelöst.
- Danach wird die tatsächliche Kontur der leitenden Oberfläche (z.B. Strahlrohr, Driftröhrchen) durch einen geschlossenen Polygonzug angenähert. Longitudinal werden die Stirnflächen  $Z = 0$ ,  $Z = L_z$  als Grenzflächen beibehalten. Somit erhält man ein Polyeder bestehend aus  $N_B$  Eckpunkten, welches das geschlossene Gebiet  $G$  definiert (Abbildung 37). Der Index „B“ wird für englisch „boundary“ = Umrandung verwendet.

Es gilt:  $\varphi(\vec{r}_i) = 0$  auf  $\partial G$ ;  $\vec{r}_i \equiv \vec{r}'_{j',k',l'}$ ;  $i = 1..N_B$



**Abbildung 37** Definition einiger für die Berechnung von Dirichlet-Bedingungen auf dem Rand  $\partial G$  benötigter Größen.

Eine obere Grenze für die Anzahl  $N_B$  der benötigten Eckpunkte lässt sich für  $G = \Omega$  wie folgt angeben:



$$N_B = 2 \cdot n_x \cdot n_y + (n_z - 2) \cdot [2 \cdot (n_x + n_y)] \cong 2 \cdot n_z \cdot (n_x + n_y)$$

Für gleiche Gitterzahlen in allen Raumrichtungen:

$$n \equiv n_x = n_y = n_z$$

erhält man:

$$N_B \leq 4n^2 \quad ; \quad N_G = n^3$$

Daher gilt die Abschätzung:

$$N_B \sim n^2 \quad ; \quad N_B \ll N_G \quad (4.38)$$

Trotz dieses günstigen Umstandes wird im Laufe der weiteren Ausführungen gezeigt, dass sich der Rechen- und Speicherplatzaufwand vieler Rechenschritte erheblich steigert, und zwar von der Ordnung  $O(N_G)$  im Falle des quaderförmigen Gebietes  $\Omega$  zur Ordnung  $O(N_B \times N_G)$  im vorliegenden Fall.

So bilden zum Beispiel die Greensfunktionen  $G(\vec{r}_{j,k,l}, \vec{r}_i')$  eine Matrix aus  $N_B(i) \times N_G(j,k,l)$ -Elementen.

- Ausgehend von den Eckpunkten des Polyeders  $G$  wird ein Satz von Greensfunktionen gemäß Gleichung (4.34) definiert:

$$G(\vec{r}_{j,k,l}, \vec{r}_i') \equiv G_i(\vec{r}_{j,k,l}) = \frac{1}{4\pi |\vec{r}_{j,k,l} - \vec{r}_i'|} \quad \text{mit } i = 1..N_B \quad (4.39)$$

Diese erfüllen gemäß Gleichung (4.35) die Bedingungen:

$$\Delta G_i(\vec{r}_{j,k,l}) = \begin{cases} 0 & \text{für } \vec{r}_{j,k,l} \neq \vec{r}_i \\ 1 & \text{für } \vec{r}_{j,k,l} = \vec{r}_i \end{cases} \quad (4.40)$$

Wie bereits erwähnt, ist die Berechnung der Greensfunktionen  $G_i(\vec{r}_{j,k,l})$  von der Ordnung  $O(N_B \times N_G)$ . Diese muss jedoch bei konstanter Geometrie nur je einmal, also nicht bei jedem Raumladaufufruf durchgeführt werden, da die Funktionen  $G_i(\vec{r}_{j,k,l})$  nur von der Geometrie der leitenden Oberflächen abhängen.

- Anschließend kann das korrigierte Potential  $\phi(\vec{r}_{j,k,l})$  wie folgt berechnet werden:

$$\phi(\vec{r}_{j,k,l}) = \phi_0(\vec{r}_{j,k,l}) + \sum_{i=1}^{N_B} \alpha_i \cdot G_i(\vec{r}_{j,k,l}) \quad (4.41)$$

Hierfür müssen die Koeffizienten  $\alpha_i$  bekannt sein. Man erhält diese, indem  $\phi(\vec{r}_i) = 0$  auf dem Rand  $\partial G$  angesetzt ( $\vec{r}_i \in \partial G$ ) und das  $N_B \times N_B$ -fache lineare Gleichungssystem

$$\phi_0(\vec{r}_i) + \sum_{s=1}^{N_B} \alpha_s \cdot G_s(\vec{r}_i) = 0 \quad ; \quad i = 1..N_B \quad , \quad s = 1..N_B \quad (4.42)$$

gelöst wird. Dabei bezeichnet der Index  $i$  die  $i$ -te Gleichung (und gleichzeitig den  $i$ -ten Punkt auf dem Rand  $\partial G$ ) und  $s$  ist der Laufindex über alle anderen Punkte  $\vec{r}_s \in \partial G$  mit  $s \neq i$ .

Gleichung (4.42) kann in Matrixform auch wie folgt geschrieben werden:

$$\sum_{s=1}^{N_B} \alpha_s \cdot G_{i,s} = -\varphi_{0,i} \quad (4.43)$$

Die Lösungen  $\alpha_s$  erhält man wie folgt:

$$\alpha_s = -\sum_{i=1}^{N_B} \varphi_{0,i} \cdot G_{i,s}^{-1} \quad (4.44)$$

- Somit sind alle zur Bestimmung des korrigierten Potentials  $\phi(\vec{r}_{j,k,l})$  nach Gleichung (4.41) benötigten Größen bekannt. Die Berechnung durch direktes Einsetzen in Gleichung (4.41) ist jedoch von der Ordnung  $O(N_B \times N_G)$ , da man  $N_G$  Gleichungen hat, die jeweils aus  $N_B + 1$  Summanden bestehen.

Daher wird Gleichung (4.41) nicht explizit berechnet, sondern man wendet die Poisson-Gleichung darauf an:

$$-\frac{\rho(\vec{r}_{j,k,l})}{\epsilon_0} = -\frac{\rho_0(\vec{r}_{j,k,l})}{\epsilon_0} + \sum_{i=1}^{N_B} \alpha_i \cdot \delta_{\vec{r}_{j,k,l}, \vec{r}_i}$$

bzw. nach  $\rho(\vec{r}_{j,k,l})$  umgeformt:

$$\rho(\vec{r}_{j,k,l}) = \rho_0(\vec{r}_{j,k,l}) - \epsilon_0 \sum_{i=1}^{N_B} \alpha_i \cdot \delta_{\vec{r}_{j,k,l}, \vec{r}_i} = \rho_0(\vec{r}_{j,k,l}) + \rho_1(\vec{r}_{j,k,l}) \quad (4.45)$$

Gleichung (4.45) kann wie folgt interpretiert werden: Die Spiegelladungen auf der Oberfläche  $\partial G$  erzeugen eine zusätzliche Ladungsdichteverteilung

$\rho_1(\vec{r}_{j,k,l}) = -\epsilon_0 \sum_{i=1}^{N_B} \alpha_i \cdot \delta_{\vec{r}_{j,k,l}, \vec{r}_i}$ . Da nur die Punkte auf der Oberfläche ( $\vec{r}_{j,k,l} \in \partial G$ ),

ausgedrückt durch die Deltafunktion  $\delta_{\vec{r}_{j,k,l}, \vec{r}_i}$  zur Korrektur der Ladungsdichteverteilung  $\rho(\vec{r}_{j,k,l})$  beitragen, müssen auch nur die dazugehörigen Greensfunktionen  $G_s(\vec{r}_i)$  berechnet und gespeichert werden, und nicht die Greensfunktionen  $G_i(\vec{r}_{j,k,l})$  aller Punkte  $\vec{r}_{j,k,l} \in G$ ! Dadurch werden der Rechenaufwand und der Speicherbedarf erheblich reduziert.

Mit der korrigierten Ladungsdichteverteilung  $\rho(\vec{r}_{j,k,l})$  kann nach dem bereits im Kapitel 4.2.2 beschriebenen Verfahren weiter gerechnet werden. Man erhält die Werte  $\phi(\vec{r}_{j,k,l})$  und  $\vec{E}(\vec{r}_{j,k,l})$  im gesamten quaderförmigen Gebiet  $\Omega$ , wobei nur die Werte für  $\vec{r}_{j,k,l} \in G$  von Bedeutung sind.

Fazit: Das hier vorgestellte Verfahren stellt eine sinnvolle Erweiterung gegenüber dem in Kapitel 4.2.2 vorgestellten Algorithmus dar, weil durch die Berücksichtigung der korrekten transversalen Geometrie leitender Oberflächen der Fehler bei der Bestimmung der poloidalen  $E_r(\phi)$ -Komponente minimiert wird.

Jedoch erkaufte man sich die Genauigkeit mit einem erheblich höheren Rechenaufwand und Speicherbedarf, so dass aus diesem Grunde bislang auf eine Implementierung in LORASR verzichtet wurde.

### Simulation offener Randbedingungen („James Algorithmus“)

Es gibt Anwendungsfälle, für welche man den Strahl als isolierte Ladungsverteilung betrachten und folglich das Strahlpotential im „freien Raum“ bestimmen muss. Es gilt dann  $\varphi = 0$  für  $R \rightarrow \infty$  und man spricht von „offenen Randbedingungen“.

Ein für diese Problemstellung zunächst von Hockney [40] vorgeschlagenes und später von James [50] optimiertes Verfahren wird nachfolgend in seinen Grundzügen vorgestellt. Eine detaillierte Beschreibung findet man in der oft zitierten Publikation von James [50]. Da dieses Verfahren in verschiedenen Varianten übernommen wurde, wurde es als „James Algorithmus“ bekannt.

In einem ersten Schritt wird die Poisson-Gleichung  $\Delta\varphi_0 = -\rho/\varepsilon_0$  mit  $\varphi_0 = 0$  auf dem Rand  $\partial\Omega$  des spatförmigen Gebietes  $\Omega$ , wie in Kapitel 4.2.2 beschrieben, gelöst. Für die weitere Beschreibung gelten daher alle Variablenbezeichnungen aus Kapitel 4.2.2 (vergl. auch Abbildung 34).

Als nächstes werden die abschirmenden Ladungen  $Q'_{0,k,l}$ ,  $Q'_{n_x,k,l}$ ,  $Q'_{j,0,l}$ ,  $Q'_{j,n_y,l}$  usw. auf allen Seitenflächen des Gebietes  $\Omega$  berechnet, welche  $\varphi_{j,k,l} = 0$  auf  $\partial\Omega$  zur Folge haben.

Hierfür wird die diskrete Poisson-Gleichung durch Bildung der zentralen Differenzenquotienten zweiter Ordnung (Sieben-Punkte-Approximation) numerisch gelöst:

$$\begin{aligned}\Delta\varphi(\vec{r}_{j,k,l}) &\equiv \Delta\varphi_{j,k,l} = \frac{\varphi_{j+1,k,l} + \varphi_{j-1,k,l} - 2\varphi_{j,k,l}}{(\Delta x)^2} + \frac{\varphi_{j,k+1,l} + \varphi_{j,k-1,l} - 2\varphi_{j,k,l}}{(\Delta y)^2} + \frac{\varphi_{j,k,l+1} + \varphi_{j,k,l-1}}{(\Delta z)^2} \\ &= -\frac{\rho'_{j,k,l}}{\varepsilon_0} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \cdot \frac{Q'_{j,k,l}}{\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z}\end{aligned}\quad (4.46)$$

Als Beispiel wird die Ebene E:  $\vec{r}_{0,k,l}$  betrachtet. Bildet man  $\Delta\varphi_{0,k,l}$  gemäß Gleichung (4.46), so sind alle Differenzenquotienten in y- und z-Richtung gleich null. Außerdem ist  $\varphi_{j,k,l}$  außerhalb des Gebietes  $\Omega$  ebenfalls (per Definition) gleich null, also  $\varphi_{j,k,l} = 0$  für  $\vec{r}_{j,k,l} \notin \Omega$ .

Daher ergibt sich aus Gleichung (4.46):

$$\frac{\varphi_{1,k,l}}{(\Delta x)^2} = -\frac{\rho'_{0,k,l}}{\varepsilon_0} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \cdot \frac{Q'_{0,k,l}}{\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z} \quad \Leftrightarrow \quad Q'_{0,k,l} = -\varepsilon_0 \cdot \frac{\Delta y \cdot \Delta z}{\Delta x} \varphi_{1,k,l} \quad (4.47)$$

Die abschirmenden Ladungen  $Q'$  auf dem Rand  $\partial\Omega$  werden dazu verwendet, um ein Korrekturpotential  $\psi_{j,k,l}$  auf dem gesamten kartesischen Gitter  $\Omega$  zu bestimmen. Man setzt hierfür, analog zu den Ausführungen aus dem vorherigen Abschnitt, eine Faltungsmethode ein. Es ist nämlich die diskrete Faltung (vergl. Gleichung (4.37)) der Ladungsdichteverteilung  $\rho'$  mit der Greensfunktion  $G(\vec{r}_{j,k,l}, \vec{r}'_{j',k',l'})$  zu bilden, wobei diesmal die Quellen  $Q'$  auf dem Rand  $\partial\Omega$  des kartesischen Gitters sitzen, also  $\vec{r}'_{j',k',l'} \in \partial\Omega$ .

Analog zur Gleichung (4.37) kann also für  $\psi_{j,k,l}$  folgender Ausdruck verwendet werden:

$$\psi(\vec{r}_{j,k,l}) = \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{j',k',l'} G(\vec{r}_{j,k,l}, \vec{r}'_{j',k',l'}) \cdot \rho'_{j',k',l'} \quad (4.48)$$

Ein direktes Lösen der Gleichung (4.48) ist wegen des hohen Rechenaufwandes von der Ordnung  $O(N_B \times N_G)$  nicht praktikabel (vergl. Diskussion im vorherigen Abschnitt;  $N_B$  ist diesmal die Anzahl der Randgitterpunkte  $\vec{r}'_{j',k',l'} \in \partial\Omega$ ).

Stattdessen entwickelt man  $G(\vec{r}_{j,k,l}, \vec{r}'_{j',k',l'})$  und  $\rho'_{j',k',l'}$  nach harmonischen Reihen und muss die passenden Koeffizienten  $\hat{G}_{m,n,p}$ ,  $\hat{\rho}'_{m,n,p}$  des dualen Gitters bestimmen. Auf die Details hierzu wird nicht näher eingegangen, sondern auf die Referenz [50] verwiesen.

Es sei lediglich erwähnt, dass man beim ursprünglich von Hockney vorgeschlagenen Algorithmus die Größe des Gebietes  $\Omega$  in jede Raumrichtung verdoppeln muss [40]. Das besondere am James-Algorithmus ist, dass die Verdopplung nur den Rand  $\partial\Omega$  betrifft, so dass der Speicherbedarf und der Rechenaufwand nur mäßig steigen.

Die Effizienz des James-Algorithmus ist von der Ordnung  $O(n^3 \cdot \log_2 n)$  (nur für die Teilrechnung zur Bestimmung des Korrekturpotentials  $\psi_{j,k,l}$  und für den Fall gleicher Gitterzahlen  $n \equiv n_x = n_y = n_z$ ).

Die Gesamtlösung für offene Randbedingungen ergibt sich schließlich durch Superposition des ursprünglichen Potentials  $\varphi_0$  mit dem Korrekturpotential  $\psi$  der fiktiven Spiegelladungen auf  $\partial\Omega$ :

$$\varphi_{j,k,l} = \varphi_{j,k,l}^0 + \psi_{j,k,l}$$

Fazit: Das hier vorgestellte Verfahren zur Simulation offener Randbedingungen ist für Strahldynamik-Rechnungen in Driftröhren-Linearbeschleunigern von untergeordneter Bedeutung: Meist befinden sich leitende Oberflächen in der Nähe des Strahls (Strahlrohr entlang von Driftstrecken oder in magnetischen Linsen, Driftröhrchen des Beschleunigers usw.), so dass die Simulation geschlossener Randbedingungen physikalisch sinnvoller ist.

Außerdem hat man auch in diesem Fall einen zusätzlichen Rechenaufwand und Speicherbedarf.

Deshalb wurde bislang auf eine Implementierung offener Randbedingungen in LORASR ebenfalls verzichtet.

## „Nearest Grid Point“ (NGP) und „Cloud In Cell“ (CIC) Methode

Wie bereits im Kapitel 4.2.2 erwähnt, sind NGP und CIC die am häufigsten verwendeten Interpolationsmethoden für die Berechnung der Ladungsdichteverteilung  $\rho_{j,k,l}$  aus einer gegebenen Makroteilchenverteilung auf einem kartesischen Gitter mit den Kantenlängen  $L_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$  (Variablenbezeichnungen gemäß Abbildung 34 und Abbildung 38).

Zur Bestimmung der Ladungsdichte  $\rho_{j,k,l}$  muss jedem Gitterpunkt  $r_{j,k,l}$  eine Ladungsmenge  $Q_{j,k,l}$  zugeordnet werden:

$$\rho_{j,k,l} = \frac{Q_{j,k,l}}{\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z}$$

wobei sich die NGP- und die CIC-Methode in der Berechnung von  $Q_{j,k,l}$  unterscheiden.

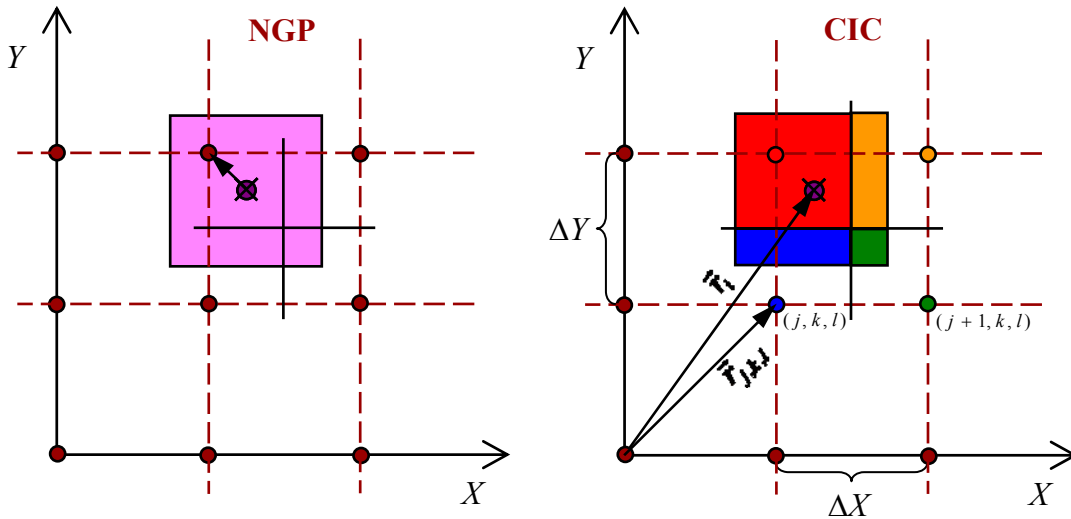
Bei der mathematisch einfacheren NGP-Methode wird die gesamte Ladung  $q$  des  $i$ -ten Makroteilchens dem nächstgelegenen Gitterpunkt zugeordnet. Damit ist  $Q_{j,k,l} = q \cdot N_{j,k,l}$ , wobei  $N_{j,k,l}$  die Anzahl der dem Gitterpunkt  $r_{j,k,l}$  zugeordneten Makroteilchen ist. Bei der

CIC-Methode wird die Makroteilchen-Ladung als homogene Wolke innerhalb eines Volumens von der Größe einer Gitterzelle  $\Delta V_i = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$  betrachtet. Jedem der acht benachbarten Gitterpunkte wird anteilig die Ladungsmenge zugeordnet, welche sich aus den jeweiligen Schnittvolumina von  $\Delta V_i$  mit den Gitterzellen-Volumina ergibt:

$$\Delta V_{i,jkl} = \Delta V_i \cap \Delta V_{j,k,l} = (\Delta x - |x_i - x_j|) \cdot (\Delta y - |y_i - y_k|) \cdot (\Delta z - |z_i - z_l|) \quad (4.49)$$

Dabei werden der Index  $i$  für die Koordinaten des Makroteilchens  $i$  und die Indizes  $j, k, l$  für die Koordinaten der Gitterpunkte  $r_{j,k,l}$  verwendet.

Wenn sich zum Beispiel das Makroteilchen  $i$  genau auf dem Gitterpunkt  $(j;k;l)$  befindet (also wenn  $r_i = r_{j,k,l}$ ), so vereinfacht sich die Gleichung (4.49) zu  $\Delta V_{i,jkl} = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ , d.h. die gesamte Ladung des Makroteilchens  $i$  wird in diesem Fall dem Gitterpunkt  $(j;k;l)$  zugewiesen. In Abbildung 38 werden die Unterschiede zwischen den beiden Methoden in der 2-dim. Projektion dargestellt.



**Abbildung 38** Generierung der Ladungsdichteverteilung  $\rho_{j,k,l}$  auf einem kartesischen Gitter nach der NGP- und der CIC-Methode.

Mathematisch lassen sich die verschiedenen Interpolationsmethoden mithilfe der Gewichtungsfunktion  $W$  ausdrücken [40]:

$$\rho_{j,k,l} \equiv \rho(\vec{r}_{j,k,l}) = \frac{q}{\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z} \cdot \sum_{i=1}^{N_p} W(\vec{r}_i - \vec{r}_{j,k,l}) \quad (4.50)$$

Dabei gibt es neben der NGP- und der CIC-Methode auch weitere Diskretisierungsverfahren, für welche  $W$  jeweils angegeben werden kann.

Setzt man zur Vereinfachung  $\vec{R}_i \equiv \vec{r}_i - \vec{r}_{j,k,l}$  und  $\vec{R}_c \equiv (\Delta x \cdot \vec{e}_x; \Delta y \cdot \vec{e}_y; \Delta z \cdot \vec{e}_z)$ , so lautet die Gewichtungsfunktion

$$W(\vec{R}_i) \equiv W(\vec{r}_i - \vec{r}_{j,k,l}) = \frac{\Delta V_{i,jkl}}{\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z}$$

für die NGP-Methode [40]:

$$W(\vec{R}_i) = \begin{cases} 1 & \text{für } |\vec{R}_i| \leq \frac{1}{2} |\vec{R}_c| \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.51)$$

und für die CIC-Methode, unter Verwendung von Gleichung (4.49) [40]:

$$W(\vec{R}_i) = \begin{cases} \left(1 - \frac{|x_i - x_j|}{\Delta x}\right) \cdot \left(1 - \frac{|y_i - y_k|}{\Delta y}\right) \cdot \left(1 - \frac{|z_i - z_l|}{\Delta z}\right) & \text{für } |\vec{R}_i| \leq |\vec{R}_c| \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.52)$$

### „Schnelle Fourier Transformation“ (Fast Fourier Transform, FFT)

Die in Kapitel 4.2.2 vorgestellte Spektralmethode verwendet Fourier-Reihen zur Beschreibung der Ladungsdichteverteilung  $\rho_{j,k,l}$  und der Potentialverteilung  $\varphi_{j,k,l}$  auf dem Gitter (Gleichungen (4.23) und (4.24)).

Um aus der bekannten Ladungsdichteverteilung die entsprechenden Potentialwerte zu berechnen, müssen jeweils die Fourier-Koeffizienten  $\rho_{m,n,p}$  und  $\varphi_{m,n,p}$  der dualen Gitter bekannt sein. Eine direkte Bestimmung mittels der inversen Fourier-Transformation, so zum Beispiel für  $\rho_{m,n,p}$  aus Gleichung (4.23):

$$\rho_{m,n,p} = \frac{1}{n_x \cdot n_y \cdot n_z} \cdot \sum_{j=0}^{n_x-1} \sum_{k=0}^{n_y-1} \sum_{l=0}^{n_z-1} \rho_{j,k,l} \cdot e^{-2\pi i \cdot \left(\frac{j \cdot m \cdot \Delta x}{L_x} + \frac{k \cdot n \cdot \Delta y}{L_y} + \frac{l \cdot p \cdot \Delta z}{L_z}\right)}$$

ist von der von der Ordnung  $O(N_G^2)$ , da man  $N_G = n_x \cdot n_y \cdot n_z$  Gleichungen zur Bestimmung aller Koeffizienten benötigt und jede dieser Gleichungen aus einer zu  $N_G$  proportionalen Anzahl von Additionen und Multiplikationen besteht.

Eine effektivere Berechnungsmöglichkeit der Fourier-Koeffizienten bietet die „Schnelle Fourier-Transformation“. Dabei gilt jedoch die Einschränkung, dass die Anzahl der äquidistanten Gitterpunkte eine Zweierpotenz (in jeder Dimension) sein muss, also zum Beispiel in  $x$ :

$$n_x \equiv 2 \cdot q = 2^r \quad q, r \in \mathbb{N} \quad (4.53)$$

In diesem Fall zerlegt die FFT die diskrete Fourier-Transformation (DFT) der Größe  $n_x = 2 \cdot q$  in zwei kleinere DFTs der Größe  $q$ . Diese sogenannte „Reduktion“ wird  $r$ -malig angewendet. Jeder Reduktionsschritt erfordert  $n_x/2$  komplexe Multiplikationen [43]. Der Rechenaufwand ist daher  $r \cdot n_x/2 = n_x \cdot \log_2 n_x$ . Dadurch wird die Anzahl der arithmetischen Operationen von der Ordnung  $O(N^2)$  auf die Ordnung  $O(N \cdot \log_2 N)$  reduziert („Cooley-Tukey Algorithmus“, [45]).

Die Funktionsweise eines FFT-Algorithmus wird anhand eines vereinfachten Beispiels (eindimensionale Linienladungsdichte  $\rho_j$ , vergl. Abbildung 39) erläutert.

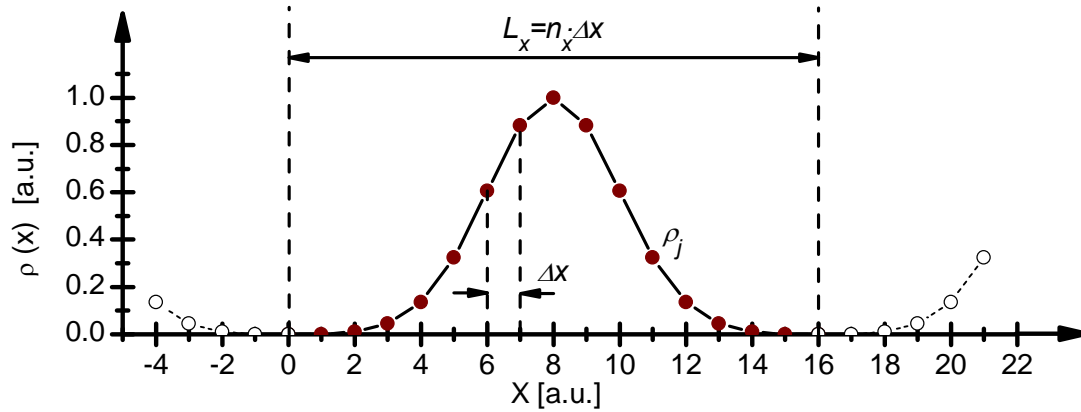
Gleichung (4.23) reduziert sich im eindimensionalen Fall zu:

$$\rho_j \equiv \rho(x_j) = \sum_{m=0}^{n_x-1} \tilde{\rho}_m \cdot e^{-2\pi i \cdot \frac{m \cdot j \cdot \Delta x}{L_x}}, \quad j = 0, 1, \dots, n_x - 1 \quad (4.54)$$

mit der inversen, diskreten Fourier-Transformation (IDFT):

$$\tilde{\rho}_m = \frac{1}{n_x} \sum_{j=0}^{n_x-1} \rho_j \cdot e^{-2\pi i \cdot \frac{j \cdot m \cdot \Delta x}{L_x}}, \quad m = 0, 1, \dots, n_x - 1 \quad (4.55)$$

Die Tilde wird hier zur Unterscheidung zwischen Gitterwerten und Fourier-Koeffizienten verwendet.



**Abbildung 39** „Abtasten“ einer kontinuierlichen, periodischen Funktion (hier: eindimensionale Linienladungsdichte) für die Fourier-Analyse.

Ist die Anzahl der Summanden aus Gleichung (4.54) eine Zweierpotenz, wie mit Gleichung (4.53) definiert und gefordert, so lässt sich diese:

$$\rho_j = \sum_{m=0}^{n_x-1} \tilde{\rho}_m \cdot e^{-2\pi i \frac{m \cdot j \cdot \Delta x}{L_x}} = \sum_{m=0}^{2q-1} \tilde{\rho}_m \cdot e^{-2\pi i \frac{m \cdot j \cdot \Delta x}{2 \cdot q \cdot \Delta x}} = \sum_{m=0}^{2q-1} \tilde{\rho}_m \cdot e^{-\pi i \frac{m \cdot j}{q}}$$

in Teilsummen mit geradem und ungeradem Index wie folgt zerlegen:

$$\rho_j = \sum_{m=0}^{2q-1} \tilde{\rho}_m \cdot e^{-\pi i \frac{m \cdot j}{q}} = \left( \sum_{m=0}^{q-1} \tilde{\rho}_{2m} \cdot e^{-\pi i \frac{2m \cdot j}{q}} \right) + \left( \sum_{m=0}^{q-1} \tilde{\rho}_{2m+1} \cdot e^{-\pi i \frac{(2m+1) \cdot j}{q}} \right) = \rho'_j + e^{-\pi i \frac{j}{q}} \cdot \rho''_j \quad (4.56)$$

Die neuen Größen  $\rho'_j$  und  $\rho''_j$  werden aus jeweils  $q$  statt bisher  $2q$  Summanden gebildet und

haben außerdem ausschließlich gerade ( $e^{-\pi i \frac{2m \cdot j}{q}}$ ) oder ausschließlich ungerade ( $e^{-\pi i \frac{(2m+1) \cdot j}{q}}$ ) Terme. Sie haben daher die doppelte Periodizität im Vergleich zu  $\rho_j$  und es gilt:

$$\rho'_j = \rho'_{j+q} \quad ; \quad \rho''_j = \rho''_{j+q} \quad (4.57)$$

Setzt man  $e^{-\pi i \frac{j+q}{q}} = e^{-\pi i \frac{j}{q}} \cdot e^{-\pi i} = -e^{-\pi i \frac{j}{q}}$ , so lässt sich  $\rho_j$  wie folgt mit Hilfe der Teilsummen  $\rho'_j$  und  $\rho''_j$  schreiben:

$$\rho_j = \begin{cases} \rho'_j + e^{-\pi i \frac{j}{q}} \cdot \rho''_j & \text{für } j < q \\ \rho'_{j-q} - e^{-\pi i \frac{j-q}{q}} \cdot \rho''_{j-q} & \text{für } j \geq q \end{cases} \quad (4.58)$$

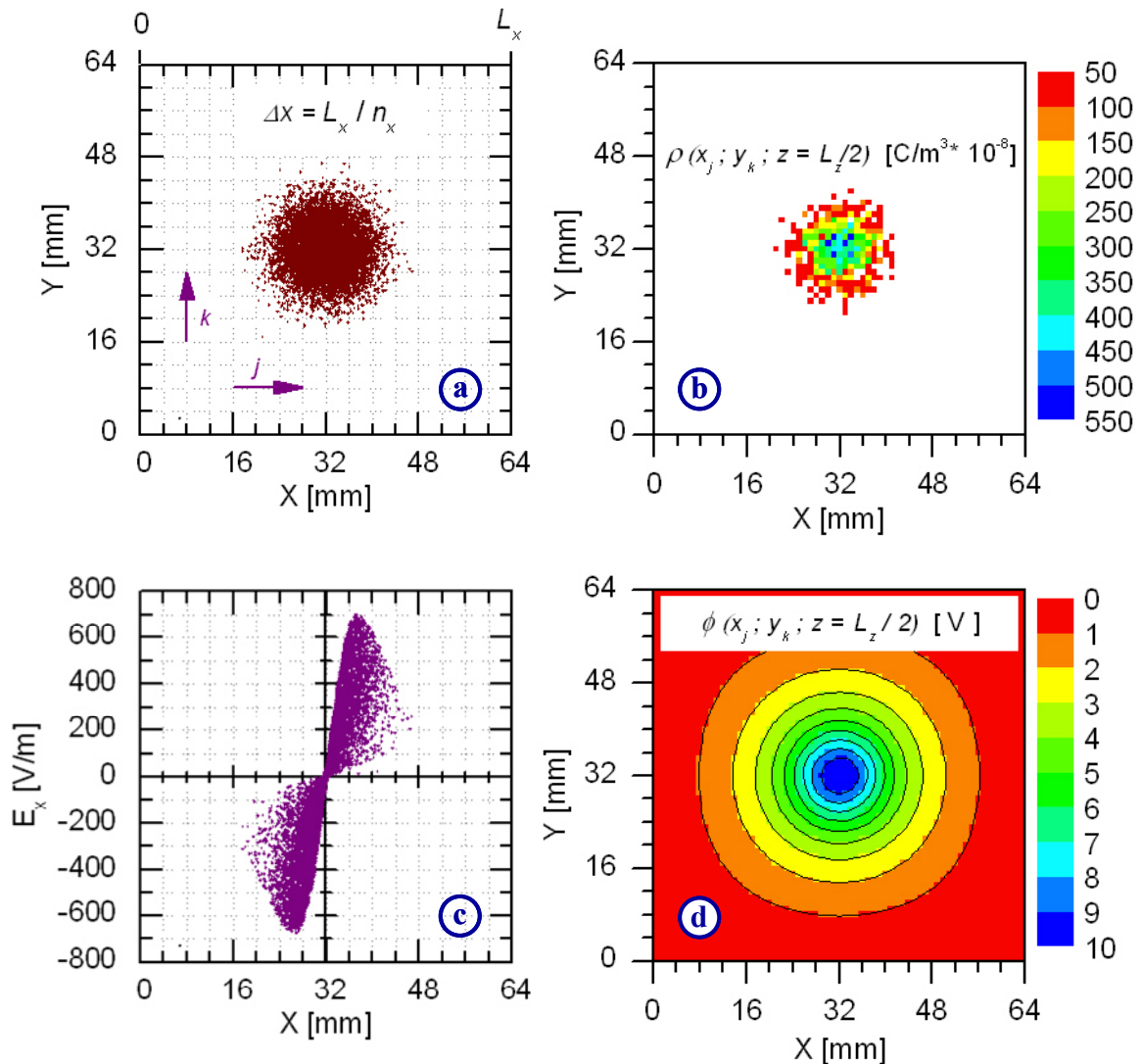
Somit ist gezeigt, dass sich die Berechnung von  $\rho_j$  in zwei Teilsummen  $\rho'_j$  und  $\rho''_j$  überführen lässt. Die Gesamtanzahl der Summanden ist wegen der Periodizität von  $\rho'_j$  und  $\rho''_j$  nur halb so groß ( $n_x/2$  statt  $n_x$ ), wodurch nach ( $r$ -maliger) rekursiver Anwendung dieses Verfahrens die bereits diskutierte Erhöhung der Recheneffizienz entsteht.

### 4.3. Beschreibung des für LORASR entwickelten 3D PIC FFT Algorithmus

Nachdem im Verlauf dieses Kapitels verschiedene Optionen bei der Implementierung spektraler Poisson-Solver bereits ausführlich diskutiert wurden, werden abschließend die Besonderheiten des speziell für das Teilchensimulationsprogramm LORASR (vergl. Kapitel 3.2) im Rahmen der vorliegenden Arbeit implementierten Algorithmus vorgestellt.

Eine Effizienzanalyse am Ende dieses Kapitels lässt, insbesondere im Vergleich zum ursprünglichen auf die Particle-Particle (PP) Methode basierenden LORASR-Raumladungssolver, die Vorteile des neuen Algorithmus deutlich werden.

Zur Veranschaulichung wurde das Beispiel einer Gauß-Verteilung gemäß Abbildung 40 mit dem LORASR-Raumladungssolver gerechnet. Anders als beim „Routineeinsatz“ in LORASR wurden hier die Anzahl der Gitterpunkte ( $N_G = 64 \times 64 \times 64$ ) sowie die Größe der Gitterbox ( $L_x, L_y, L_z$ ) manuell gesetzt.



**Abbildung 40** Beispiel für die Berechnung der Größen  $\rho_{j,k,l}$ ,  $\phi_{j,k,l}$  sowie  $E_x(x_j; y_k; z_l)$  für eine Gauß-Verteilung aus  $10^4$  Makroteilchen mit  $\sigma_x = \sigma_y = 4$  mm und  $\sigma_z = 8$  mm, bei einem Strahlstrom  $I_{bunch}$  von 1 mA  $^{238}\text{U}^{28+}$  und der Frequenz  $f_{rf}$  von 108.408 MHz. Die Ladungsverteilung befindet sich im Zentrum eines Quaders  $\Omega$  mit den Kantenlängen  $L_x = L_y = 64$  mm und  $L_z = 184$  mm.



#### 4.3.1. Hauptschritte des PIC FFT Algorithmus

##### Diskretisierung der Ladung und Bestimmung von $\rho_{j,k,l}$ auf dem Gitter

Um die Ladungsverteilung wird eine Gitterbox mit den Kantenlängen  $L_x, L_y, L_z$  gesetzt (vergl. Abbildung 34 und Abbildung 40). Die Größe der Gitterbox richtet sich in den transversalen Ebenen nach der jeweiligen Apertur der Komponenten entlang des Beschleunigers, und zwar:

$$L_x, L_y = \begin{cases} 1.2 \cdot \varnothing_i & \text{für Driftröhrenstrukturen} \\ \varnothing_i & \text{sonst (Driftstrecken, Linsen usw.)} \end{cases} \quad (4.59)$$

Dabei ist  $\varnothing_i$  der Innendurchmesser des Strahlrohrs im Bereich des jeweiligen Elements. Im Bereich der Driftröhrenstrukturen wurde der Wert  $1.2 \cdot \varnothing_i$  angesetzt, um zu berücksichtigen, dass es in den Gaps eigentlich keine geschlossenen Randbedingungen gibt.

In der longitudinalen Richtung gibt es ebenfalls keine geschlossenen Randbedingungen. Diese sind jedoch für den verwendeten spektralen Solver notwendig, so dass als Kompromiss  $L_z$  wie folgt gesetzt wurde:

$$L_z = \beta\lambda / 2 \quad (4.60)$$

Dadurch werden in longitudinaler Richtung periodische Randbedingungen definiert: Bei  $\beta\lambda$  - Strukturen vom Alvarez-Typ befindet sich normalerweise je ein Bunch in jeder Resonatorzelle. Der Bunch-Abstand beträgt also  $\beta\lambda$ . Bei  $\beta\lambda / 2$  -Strukturen bleibt jede zweite Zelle leer, da dort das elektrische Feld in den Gaps abwechselnd in bzw. gegen die Flugrichtung der Teilchen gerichtet ist und maximal nur jedes zweite Gap zur Teilchenbeschleunigung genutzt werden kann (vergl. Kapitel 2.1). Somit kann in beiden Fällen jedem Bunch ein Gitter der longitudinalen Ausdehnung  $L_z = \beta\lambda / 2$  zugewiesen werden, ohne dass es zu einem Überlapp zwischen den Gittern benachbarter Bunche kommt. Diese Festsetzung ist zwar willkürlich, bei typischen Bunchlängen  $L_{\text{bunch},z} \leq 50^\circ$  wird dadurch jedoch die Bedingung erfüllt, dass das Eigenpotential des Strahls  $\varphi_{j,k,0}$  und  $\varphi_{j,k,L_z}$  an den Rändern der Gitterbox annähernd auf Null abfällt.

Die Anzahl der Gitterzellen  $n_x, n_y, n_z$  ist in allen Raumrichtungen gleich und es gilt gemäß Gleichung (4.53):

$$n_x = n_y = n_z = 2^r, \quad r \in \mathbb{N}$$

Die Gitterzahl wird abhängig von der Anzahl der Makroteilchen  $N_P$  entsprechend folgender Tabelle angepasst:

**Tabelle 4-1 Definition der Gitterzahlen für den LORASR - Raumladungssolver.**

Anzahl Makroteilchen $N_P$	Anzahl Gitterpunkte $N_G = n_x \cdot n_y \cdot n_z$
$2 < N_P \leq 10\,000$	$32\,768 = 32 \times 32 \times 32$
$10\,000 < N_P \leq 100\,000$	$262\,144 = 64 \times 64 \times 64$
$100\,000 < N_P \leq 1\,000\,000$	$2\,097\,152 = 128 \times 128 \times 128$

Dadurch wird sichergestellt, dass mindestens 10 – 100 Makroteilchen pro Gitterzelle im Zentrum der Verteilung vorhanden sind, so dass ein akzeptabler Erfahrungswert in Bezug auf

statistische Fluktuationen bei der Diskretisierung erreicht wird (diese Problematik wird in Kapitel 5 ausführlich diskutiert).

Andererseits würde die Verwendung des feinsten Gitters ( $128 \times 128 \times 128$ ) für jede beliebige Makroteilchenzahl  $N_P$  zu einer erheblichen Verschlechterung der Recheneffizienz führen, insbesondere für  $N_P \leq 10\,000$ , da der Rechenaufwand des PIC-Algorithmus von der Ordnung  $O(\alpha \cdot N_P + \beta(N_G \cdot \log_2 N_G))$  ist (vergl. Kapitel 4.2.2 und Kapitel 4.3.2).

Zur Berechnung der Ladungsdichteverteilung  $\rho_{j,k,l}$  aus der gegebenen Makroteilchenverteilung wird die „Nearest Grid Point“ (NGP) Methode, wie im Kapitel 4.2.3 beschrieben, verwendet. Die gesamte Ladung eines jeden Makroteilchens wird dem nächstgelegenen Gitterpunkt zugeordnet, so dass man die Gleichungen (4.50) und (4.51) wie folgt zusammenfassen kann:

$$\rho_{j,k,l} = \frac{q \cdot N_{j,k,l}}{\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z} \quad (4.61)$$

Dabei sind  $q$  die Ladung eines Makroteilchens,  $N_{j,k,l}$  die Anzahl der dem Gitterpunkt  $(x_j, y_k, z_l)$  zugewiesenen Makroteilchen und  $\Delta x = L_x / n_x$ ,  $\Delta y = L_y / n_y$ ,  $\Delta z = L_z / n_z$  die Gitter-Intervalllängen.

In Abbildung 40 b wird die Berechnung von  $\rho_{j,k,l}$  in der Schnittebene  $x_j, y_k, z = L_z / 2$  anhand eines Beispiels illustriert. Man erkennt, dass es selbst in der Nähe des Kerns der Teilchenverteilung einige „leere“ Zellen, also mit  $\rho_{j,k,l} = 0$  gibt. Es ist jedoch zu berücksichtigen, dass die Anzahl der Gitterzellen für dieses Beispiel künstlich hochgesetzt wurde: 10000 Makroteilchen wurden auf  $64^3 = 262\,144$  Gitterpunkte verteilt.

### Lösen der Poisson-Gleichung auf dem Gitter

Im nächsten Schritt wird die Ladungsdichteverteilung  $\rho_{j,k,l}$  durch eine Fourier-Reihe angenähert, um die Koeffizienten  $\tilde{\rho}_{m,n,p}$  des dualen Gitters zu bestimmen.

Da es sich um Dirichlet'sche Randbedingungen auf dem Rand  $\partial\Omega$  des spatförmigen Gebietes  $\Omega$  handelt, d.h. die Werte  $\varphi_{j,k,l}$  sind gleich Null auf dem Rand  $\partial\Omega$ , können für die Reihenentwicklung anstelle der komplexen Darstellungen von  $\rho_{j,k,l}$  und  $\varphi_{j,k,l}$  gemäß Gleichungen (4.23) und (4.24) lediglich (reelle) Sinusfunktionen verwendet werden.

Somit lauten die entsprechenden Fourier-Darstellungen der Ladungsdichteverteilung und des Gitterpotentials wie folgt (für die Definition der Indizes und der geometrischen Längenbezeichnungen gilt weiterhin Abbildung 34):

$$\rho_{j,k,l} = \sum_{m=0}^{n_x-1} \sum_{n=0}^{n_y-1} \sum_{p=0}^{n_z-1} \tilde{\rho}_{m,n,p} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_x} \cdot m \cdot j \cdot \Delta x\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_y} \cdot n \cdot k \cdot \Delta y\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_z} \cdot p \cdot l \cdot \Delta z\right) \quad (4.62)$$

$$\varphi_{j,k,l} = \sum_{m=0}^{n_x-1} \sum_{n=0}^{n_y-1} \sum_{p=0}^{n_z-1} \tilde{\varphi}_{m,n,p} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_x} \cdot m \cdot j \cdot \Delta x\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_y} \cdot n \cdot k \cdot \Delta y\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_z} \cdot p \cdot l \cdot \Delta z\right) \quad (4.63)$$

Die Berechnung der dualen Koeffizienten  $\tilde{\rho}_{m,n,p}$  aus Gleichung (4.62) erfolgt mittels einer schnellen Fourier-Transformation (FFT). Hierfür wird eine eindimensionale Sinus-Transformation verwendet, welche als vordefinierte Funktion im Umfang der SSL II Programmbibliothek [51] des Lahey-Fujitsu Fortran 95 v5.6 Compilers [31] vorliegt.

Die Reihenentwicklungen aus Gleichung (4.62) und (4.63) erfordern eine dreidimensionale Fourier-Transformation für die Bestimmung der Koeffizienten  $\tilde{\rho}_{m,n,p}$  bzw.  $\tilde{\varphi}_{m,n,p}$ :

$$\tilde{\rho}_{m,n,p} = \frac{8}{n_x \cdot n_y \cdot n_z} \sum_{j=0}^{n_x-1} \sum_{k=0}^{n_y-1} \sum_{l=0}^{n_z-1} \rho_{j,k,l} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_x} j m \Delta x\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_y} k n \Delta y\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_z} l p \Delta z\right) \quad (4.64)$$

Da die meisten mathematischen Softwarepakete und integrierten Entwicklungsumgebungen eher über eindimensionale FFT Funktionen verfügen, wurde eine Methode entwickelt, welche jeweils eindimensionale FFTs in den Variablen  $x$ ,  $y$ , und  $z$  anwendet und deren Koeffizienten als Zwischenergebnisse für die Bestimmung von  $\tilde{\rho}_{m,n,p}$  bzw.  $\tilde{\varphi}_{m,n,p}$  verwendet.

Die Einzelschritte dieser Methode lauten wie folgt:

- Anwendung einer eindimensionalen FFT in x-Richtung

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_{m,k,l} &= \frac{2}{n_x} \sum_{j=0}^{n_x-1} \rho_{j,k,l} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_x} \cdot j \cdot m \cdot \Delta x\right) \\ \Rightarrow \tilde{\rho}_{m,n,p} &= \frac{4}{n_y \cdot n_z} \sum_{k=0}^{n_y-1} \sum_{l=0}^{n_z-1} \sin\left(\frac{\pi}{L_y} \cdot k \cdot n \cdot \Delta y\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_z} \cdot l \cdot p \cdot \Delta z\right) \tilde{\alpha}_{m,k,l} \end{aligned} \quad (4.65)$$

- Anwendung einer eindimensionalen FFT in y-Richtung

$$\tilde{\beta}_{m,n,l} = \frac{2}{n_y} \sum_{k=0}^{n_y-1} \tilde{\alpha}_{m,k,l} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_y} \cdot k \cdot n \cdot \Delta y\right) \quad (4.66)$$

- Anwendung einer eindimensionalen FFT in z-Richtung

$$\tilde{\rho}_{m,n,p} = \frac{2}{n_z} \sum_{l=0}^{n_z-1} \tilde{\beta}_{m,n,l} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_z} \cdot l \cdot p \cdot \Delta z\right) \quad (4.67)$$

Diese Methode der Rückführung einer dreidimensionalen Fourier-Transformation in verschachtelte, eindimensionale Transformationen hat den Vorteil, dass der Algorithmus leicht auf andere Entwicklungsplattformen übertragen („portiert“) werden kann, da eindimensionale FFTs, wie bereits erwähnt, weit verbreitet sind.

Der Rechen- und Speicheraufwand der verschachtelten Anwendung von eindimensionalen FFTs ist vergleichbar mit der direkten Anwendung einer dreidimensionalen FFT, da diese intern einen äquivalenten Algorithmus verwendet [44].

Für die Bestimmung des Potentials  $\varphi_{j,k,l}$  auf dem Gitter mit Gleichung (4.63) müssen nur noch die Koeffizienten  $\tilde{\varphi}_{m,n,p}$  des dualen Gitters bekannt sein. Diese erhält man analog zu den Ausführungen aus Kapitel 4.2.2, indem man den Ausdruck für  $\varphi_{j,k,l}$  aus Gleichung (4.63) in die Poisson-Gleichung (4.21) einsetzt:

$$\begin{aligned} \Delta \varphi_{j,k,l} &= -\pi^2 \sum_m \sum_n \sum_p \left( \frac{m^2}{L_x^2} + \frac{n^2}{L_y^2} + \frac{p^2}{L_z^2} \right) \tilde{\varphi}_{m,n,p} \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_x} m x_j\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_y} n y_k\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi}{L_z} p z_l\right) \\ &= -\pi^2 \left( \frac{m^2}{L_x^2} + \frac{n^2}{L_y^2} + \frac{p^2}{L_z^2} \right) \varphi_{j,k,l} = -\frac{\rho_{j,k,l}}{\varepsilon_0} \end{aligned} \quad (4.68)$$

Anschließend werden in Gleichung (4.68) für  $\rho_{j,k,l}$  und  $\varphi_{j,k,l}$  die Ausdrücke aus den Gleichungen (4.62) und (4.63) eingesetzt.

Durch Vergleich der Koeffizienten erhält man schließlich die gesuchte Beziehung zwischen den Koeffizienten  $\tilde{\rho}_{m,n,p}$  bzw.  $\tilde{\varphi}_{m,n,p}$ :

$$\tilde{\varphi}_{m,n,p} = \frac{\tilde{\rho}_{m,n,p}}{\epsilon_0 \pi^2 \left( \frac{m^2}{L_x^2} + \frac{n^2}{L_y^2} + \frac{p^2}{L_z^2} \right)} \quad (4.69)$$

Gleichung (4.69) ist bis auf den Faktor 4 mit der entsprechenden, in Kapitel 4.2.2 hergeleiteten Gleichung (4.26) identisch. Der Faktor 4 resultiert aus der Verwendung von Sinusfunktionen mit der Grundperiode  $\pi$  anstelle der komplexen Darstellung mit Exponentialfunktionen der Periode  $2\pi$ .

Das Gitterpotential kann nun durch Anwendung einer inversen FFT bestimmt werden, analog zu dem für die Berechnung der Koeffizienten  $\tilde{\rho}_{m,n,p}$  beschriebenen Verfahren:

$$\tilde{\varphi}_{m,n,p} \xrightarrow{(4.57), \text{FFT}} \varphi_{j,k,l}$$

In Abbildung 40 d wird die Berechnung von  $\varphi_{j,k,l}$  in der Schnittebene  $x_j; y_k; z = L_z/2$  ebenfalls anhand eines Beispiels dargestellt. Die Äquipotentiallinien zu der verwendeten Gauß-Makroteilchenverteilung sehen viel homogener aus als die Ladungsdichteverteilung  $\rho_{j,k,l}$  in der gleichen Schnittebene (Abbildung 40 b), allerdings muss berücksichtigt werden, dass sich das Potential in der Schnittebene  $x_j; y_k; z = L_z/2$  aus den Beiträgen aller Ladungen im gesamten Volumen  $\Omega$  ergibt.

## Berechnung des elektrischen Feldes

Hierfür gelten die Ausführungen aus Kapitel 4.2.2 unverändert:

Zunächst werden die  $\vec{E}$ -Feldkomponenten auf dem Gitter durch Bildung der symmetrischen Differenzenquotienten berechnet (Gleichung (4.28)), z.B. für  $E_x$ :

$$E_x(x_j; y_k; z_l) = -\frac{\varphi_{j+1,k,l} - \varphi_{j-1,k,l}}{2 \cdot \Delta x}$$

Anschließend werden die Werte von den benachbarten Gitterpunkten zum genauen Ort eines jeden Makroteilchens  $i$  transformiert, mittels einer multilineareren Interpolation gemäß Gleichung (4.29).

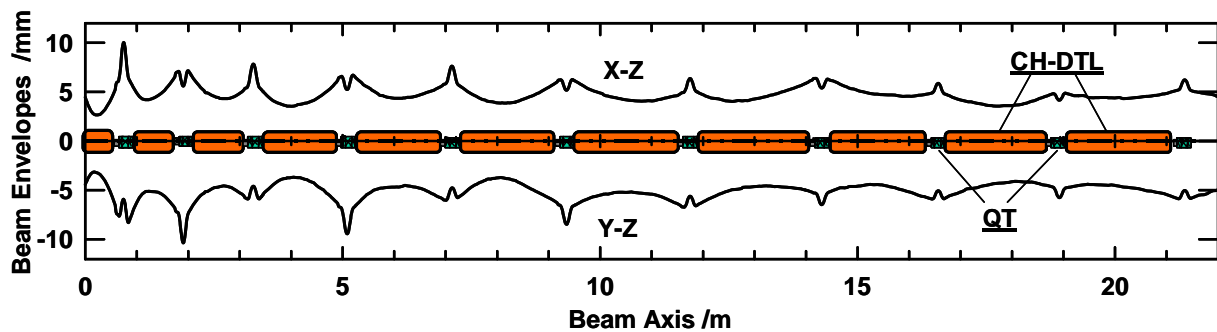
In Abbildung 40 c werden die nach dieser Methode berechneten  $E_x$ -Feldkomponenten aller Teilchen im Volumen  $\Omega$  aufgetragen, also nicht nur die Werte aus der Schnittebene  $x_j; y_k; z = L_z/2$ , wie es in Abbildung 40 b und d der Fall war. Man beobachtet ein vom Bunchzentrum aus zunächst linear, dann parabolisch ansteigendes Feld bis zu einem Maximum bei ca.  $|x - \bar{x}| = 5.26 \text{ mm}$ , also beim Radius  $|x - \bar{x}| \approx 1.3 \sigma_x$ . Danach fällt es nach außen ebenfalls parabolisch ab. Die starke Streuung lässt sich dadurch erklären, dass nur die  $E_x$ -Feldkomponente betrachtet wird und dass man die Felder aller Teilchen, also von Teilchen mit sehr unterschiedlichen longitudinalen Koordinaten zusammengefasst hat.

#### 4.3.2. Effizienz des neuen PIC FFT Algorithmus

Als Hauptmethoden für die Berechnung der Raumladungsfelder bei Verwendung von Makroteilchen wurden die Particle-Particle (PP) Methode mit einem Rechenaufwand von der Ordnung  $O(N_P^2)$  (vergl. Kapitel 4.2.1) sowie die Particle-in-Cell (PIC) Methode mit einem Rechenaufwand von der Ordnung  $O(\alpha \cdot N_P + \beta(N_G))$  (vergl. Kapitel 4.2.2) vorgestellt. Dabei ist  $N_P$  die Anzahl der Makroteilchen und  $N_G$  die Anzahl der Gitterpunkte. Die Konstante  $\alpha$  sowie die Funktion  $\beta$  hängen von der Wahl der Methode zur Lösung der Poisson-Gleichung auf dem Gitter ab [40]. Im Falle der spektralen Methode unter Verwendung der „Schnellen Fourier Transformation“ (FFT) ist  $\beta$  von der Ordnung  $O(N_G \cdot \log_2 N_G)$  (vergl. Abschnitt über die FFT im Kapitel 4.2.3).

Zu den ersten Tests nach der Implementierung des neuen PIC FFT Algorithmus für LORASR zählte die Überprüfung der obengenannten Angaben bezüglich der Recheneffizienz, insbesondere im Vergleich zum ursprünglichen, auf der PP-Methode basierenden LORASR-Raumladungssolver.

Als „Prüfstand“ diente ein früher Design-Entwurf des Protoneninjektors für GSI-FAIR [52], wie in Abbildung 41 dargestellt.



**Abbildung 41** LORASR Design-Beispiel (früher Entwurf für den GSI-FAIR Protonen-Linac) bestehend aus 11 Beschleunigerkavitäten und 11 Quadrupol-Triplett-Linsen.  
Entlang einer Gesamtstrecke von ca. 22 m finden 919 Raumladungsaufrufe statt.

In Tabelle 4-2 werden die mit einem 733 MHz Intel® Pentium® III erzielten Gesamtrechendauern in Abhängigkeit von der Teilchenzahl aufgelistet.

**Tabelle 4-2** Benchmarking des neuen LORASR PIC FFT Algorithmus anhand des Anwendungsbeispiels aus Abbildung 41.

Anzahl Makroteilchen $N_P$	Gesamtrechendauer	Anteil Rechendauer Raumladungsroutine
2 000	2 min	75.3 %
10 000	7 min	64.8 %
100 000	1 h 17 min	61.0 %
1 000 000	12 h 30 min	59.0 %

Hierbei ist zu berücksichtigen, dass der Test auf einem mittlerweile veralteten Rechner durchgeführt wurde. Bei Vergleichstests mit aktuellen Prozessoren wurde festgestellt, dass sich die Rechendauer grob mit der Taktfrequenz des Prozessors skalieren lässt. Folglich beträgt die typische Rechendauer eines Laufes mit vergleichbarem Modellumfang und  $10^6$  Makroteilchen ca. 3-4 Stunden auf einem Rechner mit zeitaktueller Konfiguration.

Auf einem Multi-Core-Prozessor bestehend aus  $n$  Kernen könnte die Rechengeschwindigkeit nochmals maximal um den Faktor  $n$  erhöht werden. Leider wurde hierfür aber noch keine parallele LORASR-Version implementiert.

Aus Tabelle 4-2 ist auch ersichtlich, dass die Berechnung der Raumladungskräfte einen überwiegenden Anteil an der Gesamtrechendauer ausmacht. Dieser reduziert sich zwar mit steigender Teilchenzahl, bleibt dabei aber auf einem hohen Niveau. Eigentlich würde man erwarten, dass der Anteil der Raumladungsroutine an der Gesamtrechnenzeit konstant bleibt. Warum dies hier nicht der Fall ist, muss noch systematisch untersucht werden. Es wird vermutet, dass bei steigender Teilchenzahl Aufgaben der Datenverwaltung (Speichern von Zwischenergebnissen usw.) überproportional (d.h. mit einer höheren Ordnung als der Raumladungssolver) zur Rechendauer beitragen.

Die Vorteile des neuen PIC FFT Algorithmus in Bezug auf die Recheneffizienz werden erst bei den Vergleichsrechnungen mit dem alten PP-basierten LORASR Algorithmus eindrucksvoll sichtbar. Man erkennt aus Tabelle 4-3, dass ein Raumladungsaufruf mit der neuen Routine und  $10^6$  Simulationsteilchen eine vergleichbare Zeitdauer beansprucht, wie die alte PP-Routine mit  $10^4$  Simulationsteilchen. Dementsprechend dauern Validierungsrechnungen mit der neuen Routine und mit 1 000 000 Simulationsteilchen typischerweise zwischen 0.5 und 12 Stunden, je nach Größe der Anwendung. Vergleichbare Zeiträume werden mit der alten Routine für Berechnungen mit nur 10 000 Teilchen benötigt. Da ein einzelner Raumladungsaufruf mit der alten Routine und  $10^6$  Teilchen mehr als 4 Tage benötigt, ergibt sich für das Beispiel aus Abbildung 41 eine Gesamtrechendauer von über 10 Jahren! Mit der neuen Routine (28.8 s pro Raumladungsaufruf) kommt man dagegen auf 7.35 Stunden für die Raumladungsaufufe bzw. auf ca. 12.5 Stunden insgesamt (vergl. Tabelle 4-2).

**Tabelle 4-3 Benchmarking des neuen LORASR PIC FFT Algorithmus und Vergleich mit der ursprünglichen LORASR PP-Routine.**

Anzahl Makroteilchen $N_P$	Anzahl Gitterpunkte $N_G$	PP-Routine (alt) CPU Zeit / Aufruf	PIC-Routine (neu) CPU Zeit / Aufruf
2 000	32 768 (32×32×32)	1.307 s	0.103 s
10 000	32 768 (32×32×32)	34 s	0.294 s
100 000	262 144 (64×64×64)	3 500 s (58 min 20 s)	3.1 s
1 000 000	2 097 152 (128×128×128)	350 000 s (4 d 1 h 13 min)	28.8 s

Die gemessenen Werte für die alte LORASR PP-Routine gemäß Tabelle 4-3 lassen sich wie folgt abschätzen:

$$T = 3.5 \cdot 10^{-7} \cdot N_P^2 = C_0 \cdot N_P^2 \quad (4.70)$$

Damit ist nachgewiesen, dass der PP-Algorithmus von der Ordnung  $O(N_P^2)$  ist.

Für den neuen, im Rahmen der vorliegenden Arbeit implementierten PIC FFT Algorithmus wird mit wachsender Teilchenzahl auch die Anzahl der Gitterpunkte erhöht, so dass eine differenziertere Analyse der gemessenen CPU-Zeiten notwendig ist.

Diese wurde mit einem moderneren Rechner (3 GHz Intel® Pentium® 4 Prozessor) durchgeführt und in Referenz [8] erstmals publiziert.

Wie bereits diskutiert, wird folgende Abhängigkeit der CPU-Zeit von der Makroteilchenzahl  $N_P$  sowie von der Anzahl der Gitterpunkte  $N_G$  theoretisch vorhergesagt [40]:

$$T = T_1 + T_2 = C_1 \cdot N_P + C_2 \cdot N_G \cdot \log_2 N_G \quad (4.71)$$

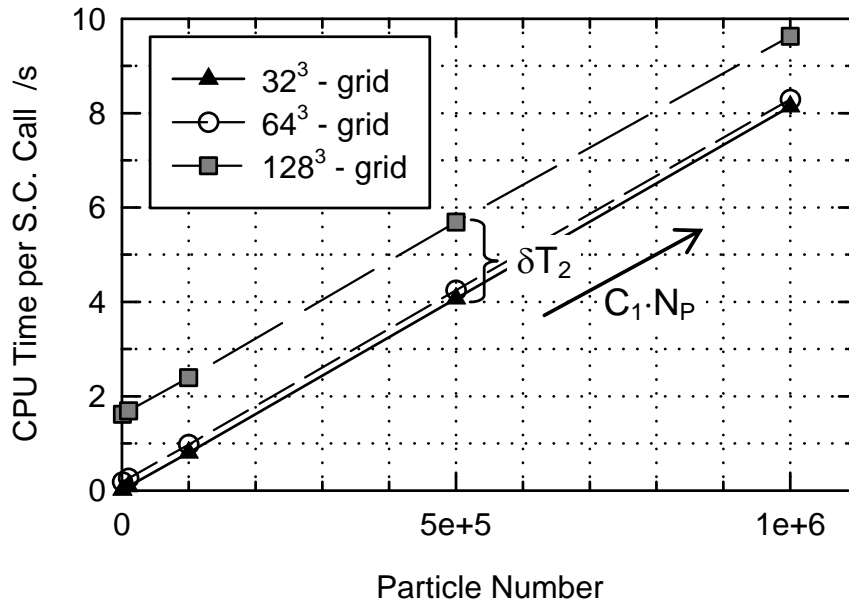
Diese Abhängigkeit wurde mit LORASR unter Verwendung der Teilchenzahlen  $N_P = 10^3$ ;  $10^4$ ;  $10^5$ ;  $5 \times 10^5$  und  $10^6$  jeweils für 3 verschiedene Gitterpunktzahlen ( $N_G = 32^3$ ;  $64^3$  und  $128^3$ ) getestet. Die Ergebnisse werden in Tabelle 4-4 und Abbildung 42 zusammengefasst.

**Tabelle 4-4 Benchmarking des neuen LORASR PIC FFT Algorithmus und Bestimmung der Parameter aus Gleichung (4.71).**

	32 <sup>3</sup> -Gitter	64 <sup>3</sup> -Gitter	128 <sup>3</sup> -Gitter
$C_1$	$8.13 \times 10^{-6}$ s	$8.11 \times 10^{-6}$ s	$8.02 \times 10^{-6}$ s
$C_2$	$5.41 \times 10^{-8}$ s	$8.06 \times 10^{-8}$ s	$10.97 \times 10^{-8}$ s
$T_2$	0.009 s	0.127 s	1.611 s
$\delta T_2$	$T_{2,64} - T_{2,32} = 0.118$ s		$T_{2,128} - T_{2,32} = 1.602$ s
$T(N_P = 10^3)$	0.017 s	0.183 s	1.619 s
$T(N_P = 10^4)$	0.091 s	0.256 s	1.688 s
$T(N_P = 10^5)$	0.804 s	0.970 s	2.394 s
$T(N_P = 5 \cdot 10^5)$	4.070 s	4.243 s	5.691 s
$T(N_P = 10^6)$	8.139 s	8.286 s	9.627 s

Die Koeffizienten  $C_1$  und  $C_2$  wurden durch Einsetzen der gemessenen Zeiten  $T$  in Gleichung (4.71) approximiert. Es zeigt sich, dass  $C_1$  annähernd unabhängig von der Wahl des Gitters ist, d.h. die gemessenen CPU-Zeiten  $T$  lassen sich in zwei unabhängige Anteile  $T = T_1 + T_2$  zerlegen, wobei  $T_1 = C_1 \cdot N_P$  tatsächlich linear von der Teilchenzahl  $N_P$  abhängt, wie aus Abbildung 42 ersichtlich. Hinzu kommt für jeden Messpunkt ein konstanter und von der Gitterpunktzahl  $N_G$  abhängiger Beitrag  $T_2$ , welcher sich wie folgt skaliert:

$$T_{2,32} = T_{2,128} \cdot \frac{32^3 \cdot \log_2(32^3)}{128^3 \cdot \log_2(128^3)} \quad (4.72)$$



**Abbildung 42** Gemessene CPU-Zeiten für einzelne Raumladauaufrufe mit der neuen PIC FFT Routine auf einem 3 GHz Intel® Pentium® 4 Rechner.

Dieses Ergebnis bestätigt die Notwendigkeit der in LORASR verwendeten Korrelation zwischen der Anzahl der Gitterpunkte und der Teilchenzahl:

- Für die Teilchenzahl  $N_p = 10^4$  beträgt beispielsweise  $T_1 = 0.082$  s,  $T_{2,32} = 0.009$  s und  $T_{2,128} = 1.611$  s, d.h. bei Verwendung eines  $32^3$ -Gitters, wie in LORASR bei  $10^4$  Teilchen vorgesehen, gilt  $T_1 \gg T_2$  und die CPU-Zeit hängt in erster Linie von der Teilchenzahl  $N_p$  ab; dagegen wäre bei Verwendung eines  $128^3$ -Gitters die Anzahl  $N_G$  der Gitterpunkte die bestimmende Größe ( $T_2 \gg T_1$ ) und die CPU-Zeit  $T = T_1 + T_2$  würde sich um ein Vielfaches erhöhen.
- Für  $N_p = 10^6$  ist dagegen der  $N_p$ -abhängige Term immer dominant ( $T_1 = 8.016$  s,  $T_{2,32} = 0.009$  s und  $T_{2,128} = 1.611$  s), d.h. die Wahl eines feinmaschigen Gitters erhöht den Rechenaufwand nur unwesentlich.



## **5. Validierung des neuen PIC-FFT Poisson-Solvers und Benchmarking innerhalb der HIPPI-Kollaboration**

### **5.1. Die HIPPI-Kollaboration**

Die im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelte neue Raumladroutine konnte innerhalb der von der EU geförderten „HIPPI“-Kollaboration erfolgreich getestet und validiert werden („HIPPI“ = High Intensity Pulsed Proton Injectors [53]).

Die HIPPI-Kollaboration ist gemäß der offiziellen EU-Bezeichnung eine „Gemeinsame Forschungsaktivität“ (englisch: „Joint Research Activity“, JRA) und als solche ein Teil der „integrierten Infrastrukturinitiative“ „CARE“ (Coordinated Accelerator Research in Europe [54]).

Die Forschungsaktivitäten der Teilnehmer am CARE-Projekt werden von der EU-Kommission innerhalb des 6. EU-Forschungsrahmenprogramms („FP6“) im Zeitraum von 2004 bis 2008 teilfinanziert. Die Zielsetzung von CARE ist, eine gemeinsame europäische Plattform für die Entwicklung von Teilchenbeschleunigern zu etablieren. Dadurch sollen sowohl die Infrastruktur existierender Großforschungsanlagen wie CERN, DESY, GSI usw. verbessert werden, als auch die F&E-Aktivitäten im Hinblick auf den Ausbau vorhandener oder die Planung neuer Anlagen besser koordiniert und konzentriert werden. Weitere Details zum CARE-Projekt findet man unter [54] und [55].

Die HIPPI-Kollaboration innerhalb von CARE hat als Ziel, eine gemeinsame europäische Technologie-Basis für den Bau gepulster, hochintensiver Protonenbeschleuniger voranzutreiben. Davon sollen in erster Linie existierende Großforschungsanlagen profitieren, und zwar:

- Die Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt, welche den Aufbau eines dedizierten Protonen-Linacs [56] im Rahmen des FAIR-Projektes vorsieht, wodurch der verfügbare Protonenfluß für die Injektion in das Synchrotron SIS erheblich erhöht wird.
- Die Europäische Organisation für Kernforschung CERN in Genf (französisch: „Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire“), welche den jetzigen Injektor „Linac2“ (50 MeV Protonen) durch einen neuen 160 MeV  $H^-$  - Linearbeschleuniger („Linac4“ [57]) mit dem Ziel ersetzen wird, die Luminosität des Large Hadron Colliders LHC zu erhöhen.
- Das Rutherford Appleton Laboratory RAL in Didcot, Großbritannien, welches verschiedene Erweiterungsoptionen des ISIS-Beschleunigers untersucht [58] und insbesondere innerhalb der HIPPI-Kollaboration einen schnellen Deflektor („Strahl-Chopper“) entwickelt [59], welcher eine vordefinierte Anzahl von Mikrobunchen bei niedrigen Strahlenergien entfernt, um dadurch eine optimale Synchrotron-Injektion zu gewährleisten.

Die HIPPI-Kollaboration ist in vier Arbeitspakete gegliedert, und zwar [53]:

- Normalleitende HF-Beschleunigerstrukturen.
- Supraleitende HF-Beschleunigerstrukturen.
- Strahl-Chopper.
- Strahldynamik.

Für das Arbeitspaket „Strahldynamik“, welches für die vorliegende Arbeit die größte Relevanz hat, wurden folgende Themenschwerpunkte definiert:

- Validierung und Vergleich („Benchmarking“) von Teilchensimulationsprogrammen mit besonderem Augenmerk auf die Berechnung der Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung („Raumladungskraft“).
- Experimente zum Emittanzwachstum und zur Strahl-Halo-Entstehung. Die Ergebnisse aus Maschinenexperimenten sollen idealerweise mit den Vorhersagen der Simulationsprogramme verglichen werden.
- Entwicklung neuer Strahldiagnose-Methoden für intensive Protonen- und Ionenstrahlen.

Den obengenannten Aufgabenstellungen zufolge, fanden während der gesamten Laufzeit der HIPPI-Kollaboration zahlreiche Benchmarking-Untersuchungen statt, welche sich in folgende Schritte gliedern lassen:

- Ein **„statischer“ Vergleich der Poisson-Raumladungssolver** verschiedener Simulationsprogramme [1,60], d.h. es wurden nur die Eigenfelder eines Teststrahls untereinander verglichen, ohne die Simulationsteilchen durch einen Beschleunigerkanal zu befördern. Dadurch wurde der Vergleich der Raumladungssolver von den Effekten der unterschiedlichen Modellierung der äußeren Felder der Beschleunigerkomponenten (HF-Gaps und Linsen) entkoppelt. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen werden in Kapitel 5.2 vorgestellt.
- Ein **Vergleich von Strahlsimulationsrechnungen entlang des GSI UNILAC-Alvarez-Abschnittes**. Dieser wurde in mehreren Schritten durchgeführt: Zunächst wurde mit „Nullstrom“, d.h. ohne Berücksichtigung der Raumladungskräfte gerechnet [1,60], um die Eingabedatensätze der einzelnen Programme aufeinander abzustimmen und um mögliche Unterschiede bei der Modellierung der HF-Gapfelder und der Quadrupollinsen zu untersuchen. Anschließend wurden Vergleichsrechnungen mit einem 37.5 mA,  $^{238}\text{U}^{28+}$  Teststrahl und einer angenommenen 6D-Gaußverteilung am Einschuss in den ersten UNILAC-Alvarez-Beschleuniger bei  $W = 1.4$  MeV/u durchgeführt [1]. Schließlich wurden bei der GSI im Rahmen eines dedizierten (und durch die HIPPI-Kollaboration ermöglichten) Maschinenexperiments die Teilchenverteilungen eines 7.1 mA,  $^{40}\text{Ar}^{10+}$  Strahls am Eingang sowie am Ausgang des Alvarez-Beschleunigerabschnittes gemessen und mit den Ergebnissen mehrerer Simulationsprogramme verglichen [61]. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen werden in Kapitel 5.3 vorgestellt.

Die an den diversen Benchmarking-Untersuchungen im Rahmen von HIPPI beteiligten Simulationsprogramme werden in Tabelle 5-1 aufgelistet (Quelle: [1]).

Es ist auffällig, dass die Programme unterschiedliche Konzepte zur Berechnung der Raumladungskraft, und dadurch bedingt sowohl offene als auch geschlossene Randbedingungen verwenden:

- DYNAMION verwendet als einziges HIPPI-Benchmarking-Simulationsprogramm ausschließlich die Particle-Particle (PP) Methode, d.h. die Raumladungskraft wird direkt durch Superposition der Coulombfelder aller Makroteilchen berechnet. Dadurch ist die maximale Anzahl der Simulationsteilchen aus Gründen des Rechenaufwandes (vergl. Kapitel 4.2.1 und Kapitel 4.3.2) auf unter  $10^4$  Teilchen beschränkt.
- HALODYN, IMPACT, und LORASR verwenden eigenentwickelte 3D PIC Solver, wobei sowohl spektrale Methoden wie die Schnelle Fourier Transformation (FFT), als auch Gitter-Relaxationsmethoden zum Einsatz kommen (vergl. Kapitel 4.2.2). IMPACT bietet dabei 6 verschiedene Möglichkeiten der Definition der Randbedingungen an.
- PARMILA, PARTRAN und PATH verwenden keine „vollwertigen“ 3D PIC – Verfahren, sondern machen von verschiedenen Näherungen Gebrauch, um die

Recheneffizienz zu erhöhen. Es handelt sich um die in der Beschleunigergemeinschaft recht bekannten Routinen „SCHEFF“ und „PICNIC“, welche nachfolgend näher erläutert werden.

**Tabelle 5-1 Übersicht der am HIPPI-Benchmarking-Arbeitspaket beteiligten Teilchensimulationsprogramme (alphabetisch geordnet).**

Programm	Betriebssystem	Grafische Oberfläche	Raumladungssolver	Randbedingungen
DYNAMION [62]	Windows Unix	nein	PP	offen
HALODYN [63]	Unix	separat	3D PIC FFT	geschlossen
IMPACT [64]	Unix	nein	3D PIC FFT	offen geschlossen
LORASR [17,39,Kapitel 3.2]	Windows Unix	ja	3D PIC FFT	geschlossen
PARMILA [65]	Windows	separat	3D PIC („PICNIC“); 2D R-Z („SCHEFF“)	offen
PARTRAN [66]	Windows	separat	3D PIC („PICNIC“ und „GAUSUP“); 2D R-Z („SCHEFF“)	offen
PATH	Windows	ja	PP; 2D R-Z („SCHEFF“)	offen

SCHEFF bedeutet „Space Charge Effect“ und wurde bereits Ende der 1960’er Jahre von K. R. Crandall für das PARMILA-Programm entwickelt. Es wurde zwar seinerzeit nicht dokumentiert, jedoch findet man eine ausführliche Beschreibung des verwendeten Näherungsverfahrens in dem Buch von T. P. Wangler [20]:

Die Näherung besteht darin, dass man von zylindersymmetrischen Bunchen ausgeht. Bunche mit elliptischem Querschnitt können dabei in äquivalente zylindersymmetrische Bunche transformiert werden. Jedes Makroteilchen wird als Ringladung betrachtet, welche um die Strahlachse zentriert ist. Das verwendete Gitter ist ebenfalls zylindersymmetrisch, bestehend aus  $N_r$  radialen Intervallen der Länge  $\Delta r$  und aus  $N_z$  longitudinalen Intervallen der Länge  $\Delta z$ . Wegen der verwendeten Näherung handelt es sich also um eine 2D (r-z) PIC – Methode. Die Feldkomponenten  $E_r$  und  $E_z$  werden auf dem zylindrischen Gitter durch Überlagerung der Beiträge der Ladungsringe berechnet und an die Orte der Makroteilchen interpoliert.

PICNIC bedeutet „Particle In Cell Numerical Integration Between Cube“ und wurde Ende der 1990’er Jahre an CEA Saclay entwickelt [66, 67]. Es verwendet denselben Ansatz wie SCHEFF, außer dass die Zylindersymmetrie des Strahls nicht mehr vorausgesetzt wird:

Die Makroteilchen werden den Zellen eines 3D kartesischen Gitters mit den Zelllängen  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$  zugewiesen. Die Raumladungskräfte werden durch Überlagerung der Beiträge aller Gitterzellen berechnet und an die Orte der Makroteilchen interpoliert, wobei in jedem Zellvolumen eine homogene Ladungsdichte angenommen wird.

Betrachtet man das Grundkonzept der SCHEFF- sowie der PICNIC-Routine, so handelt es sich eigentlich um Particle-Particle (PP) Solver mit der Besonderheit, dass anstelle der diskreten Makroteilchenverteilungen mit entsprechenden Ladungsdichten auf dem jeweiligen Gitter gerechnet wird.

Insofern basieren die wenigsten am HIPPI-Benchmarking beteiligten Programme auf „echten“ 3D PIC Raumladungssolvern.

Deshalb wird an dieser Stelle nochmals darauf hingewiesen, dass mit dem im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelten spektralen 3D PIC Raumladungssolver der neueste Entwicklungsstand bei den Teilchensimulationsprogrammen in der Beschleunigerphysik erreicht wurde. Zugleich stellte die HIPPI-Plattform eine willkommene Gelegenheit dar, eine eigene Neuentwicklung im Umfeld einer breiten, bereits etablierten Entwicklergemeinschaft unter wohldefinierten Kriterien zu testen und zu validieren.

## 5.2. Vergleichstests verschiedener Raumladungsroutinen

### Test der berechneten elektrischen Raumladungsfeldkomponenten unter Verwendung eines Probestrahls

Alle am Vergleichstest beteiligten Programme benutzten die gleichen Makroteilchenverteilungen, und zwar Gauß-Verteilungen mit  $10^4$ ,  $10^5$  und  $5 \times 10^5$  Teilchen. Diese haben die RMS-Radien (Definition gemäß Gleichung (2.75))  $\sigma_x = \sigma_y = 4$  mm und  $\sigma_z = 8$  mm, bei einem Strahlstrom von 1 mA  $^{238}\text{U}^{28+}$  und der Frequenz von 108.408 MHz. Für alle Programme mit PIC-Solvern wurde die Größe des Gitters fest vorgegeben, und zwar mit den Kantenlängen  $L_x = L_y = 64$  mm und  $L_z = 184$  mm. Somit wurden alle dynamischen Skalierungsoptionen der einzelnen Programme deaktiviert. Für jede der drei verschiedenen Teilchenzahlen wurden zwei Gitterauflösungen verwendet, und zwar  $64 \times 64 \times 64$  und  $128 \times 128 \times 128$ .

Die verwendete Verteilung mit  $10^4$  Teilchen wurde bereits in Abbildung 40 gezeigt, zusammen mit den vom Programm LORASR berechneten  $E_x$ -Feldkomponenten.

Mit allen am Vergleichstest beteiligten Programmen wurden die am jeweiligen Ort des Makroteilchens  $i$  interpolierten transversalen Feldkomponenten  $(E_{x,C}(x_i), E_{y,C}(y_i))$  berechnet. Diese wurden mit den Werten  $(E_{x,A}(x_i), E_{y,A}(y_i))$  einer semi-analytischen Lösung verglichen, welche man mit dem in Referenz [68] beschriebenen Algorithmus erhalten hat.

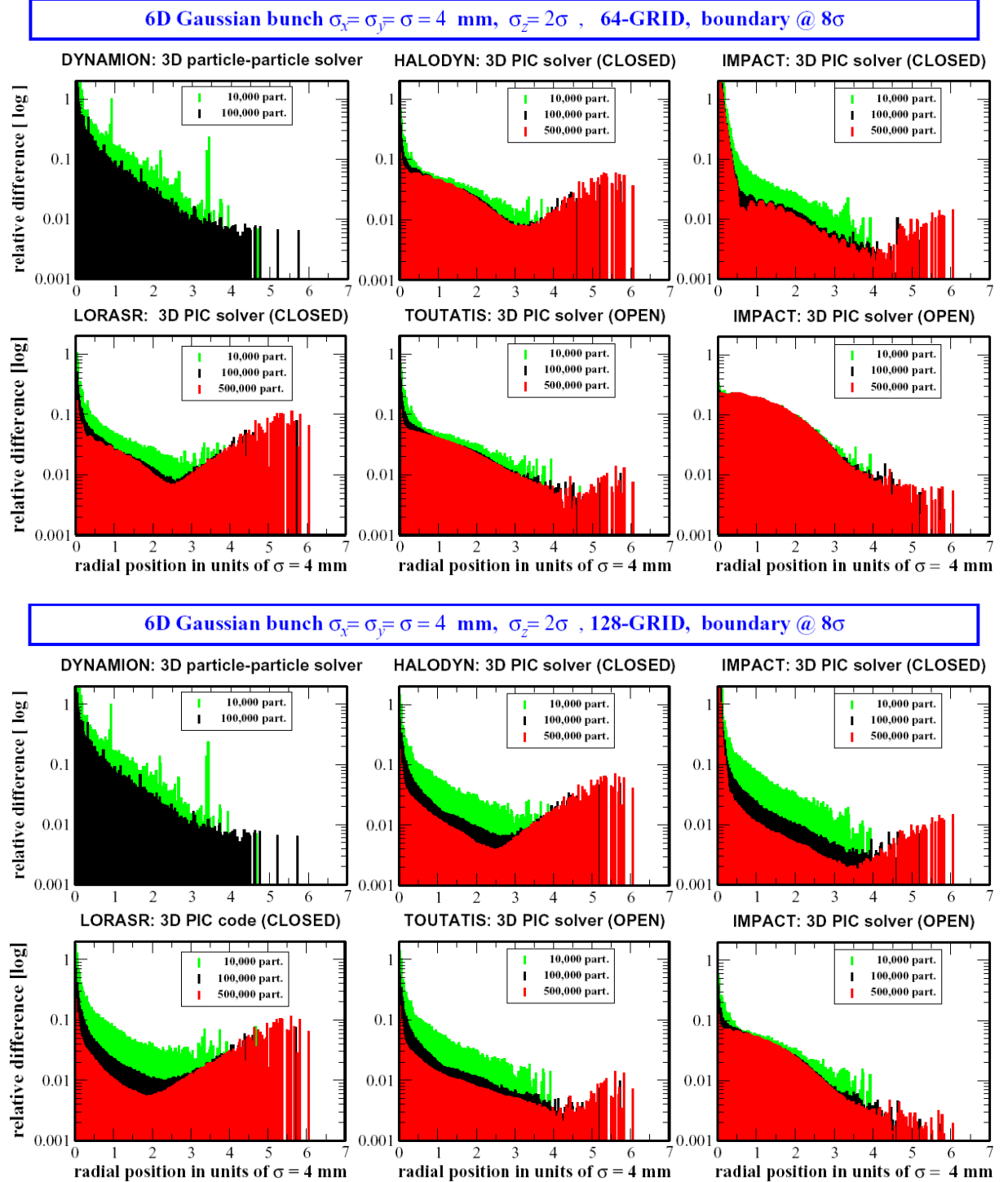
Damit lässt sich der Fehler des radialen E-Feldes für jedes Makroteilchen  $i$  wie folgt angeben:

$$E_r(r_i) = \frac{\sqrt{(E_{x,C}(x_i) - E_{x,A}(x_i))^2 + (E_{y,C}(y_i) - E_{y,A}(y_i))^2}}{\sqrt{(E_{x,A}(x_i))^2 + (E_{y,A}(y_i))^2}} \quad \text{mit} \quad r_i = \sqrt{x_i^2 + y_i^2} \quad (5.1)$$

Wird das Volumen um die Makroteilchenverteilungen in  $n$  Zylindermäntel der Dicke  $r_n \pm \delta r$  unterteilt, so kann ein gemittelter Fehler wie folgt definiert werden [1]:

$$E_r(r_n) = \langle E_r(r_i) \rangle \equiv \frac{\delta E}{E_{r,A}}(r_n) \quad \text{mit} \quad r_n = \sqrt{x_n^2 + y_n^2} \quad \text{und} \quad r_i \in [r_n - \delta r; r_n + \delta r] \quad (5.2)$$

In Abbildung 43 wird das Ergebnis der Fehleranalyse in Form des Fehlerparameters  $\delta E/E_{r,A}$  aus Gleichung (5.2) in Abhängigkeit vom Radius  $r_n$  dargestellt.



**Abbildung 43** Berechnung des Fehlers  $\delta E/E_{r,A}$  aus Gleichung (5.2) für drei verschiedene Teilchenzahlen und zwei verschiedene Gitterauflösungen (Quelle: [1]).

Zunächst erscheint es etwas verwunderlich, dass die relativen Fehler für kleine Radien maximal sind, und zwar bis zu Faktor 1 ( $\triangleq 100\%$ ). Jedoch ist für  $r = 0$  auch  $E_r = 0$  für die analytische Lösung bzw.  $E_r \approx 0$  für die numerischen Lösungen, wie man zum Beispiel in Abbildung 40 erkennen kann. Somit gilt  $\lim_{r \rightarrow 0} \delta E / E_r = 1$ , wegen  $\lim_{r \rightarrow 0} \delta E = 0$  und  $\lim_{r \rightarrow 0} E_r = 0$ .

Im weiteren radialen Verlauf fällt der relative Fehler exponentiell ab und erreicht Minimalwerte von 1% und darunter im Mittelteil („Core“) des Bunches: Je nach Programm, Teilchenzahl und Gitterauflösung ist ein Minimum etwa im Intervall  $[2\sigma_r, 4\sigma_r]$  zu beobachten.

Der Verlauf des Fehlerparameters  $\frac{\delta E}{E}(r)$  ist außerdem stark von der Teilchenzahl und der Gitterauflösung abhängig (tendenziell ist der Fehler für  $5 \times 10^5$  Teilchen und das  $128^3$ -Gitter am geringsten), und schließlich gibt es nennenswerte Unterschiede zwischen den Programmen.

Insbesondere wächst der Fehler im Randbereich („Halo“) auf bis zu 10% für die Programme mit geschlossenen Randbedingungen (HALODYN und LORASR), während die Programme mit offenen Randbedingungen auf dem 1% Niveau bleiben (DYNAMION, TOUTATIS) oder sogar weiter bis auf das 1% Niveau abfallen (IMPACT).

Dieses Verhalten lässt sich dadurch erklären, dass die analytische Lösung offene Randbedingungen voraussetzt. Bei Verwendung geschlossener (Dirichlet'scher) Randbedingungen auf dem Rand eines Quaders tritt eine „Verzerrung“ insbesondere der äußersten Äquipotentiallinien auf, d.h. diese sind im radialen Schnitt nicht mehr kreisförmig, wie bereits im Kapitel 4.2.3 diskutiert und am Beispiel aus Abbildung 35 deutlich gemacht wurde.

## Test der Einzelteilchen-Phasenvorschübe

Der Phasenvorschub (Definition gemäß Gleichung (2.34)) ist ein wesentlicher Designparameter in der Beschleunigerphysik, wie im Kapitel 2 dargelegt. Der „Nullstrom-Phasenvorschub“ wird von den äußeren Kräften, also durch die Parameter (z.B. Fokussierungsstärken) der Elemente entlang des Beschleunigers bestimmt. Die Raumladungskraft wirkt dabei in allen Raumebenen reduzierend, d.h. sie führt zu einer „Phasenvorschub-Absenkung“ (englisch: „Tune-Depression“). Diese kann zu einem resonanten Verhalten und damit verbundenen Instabilitäten führen (vergl. Zusammenstellung der wichtigsten Effekte in [20] und [23]).

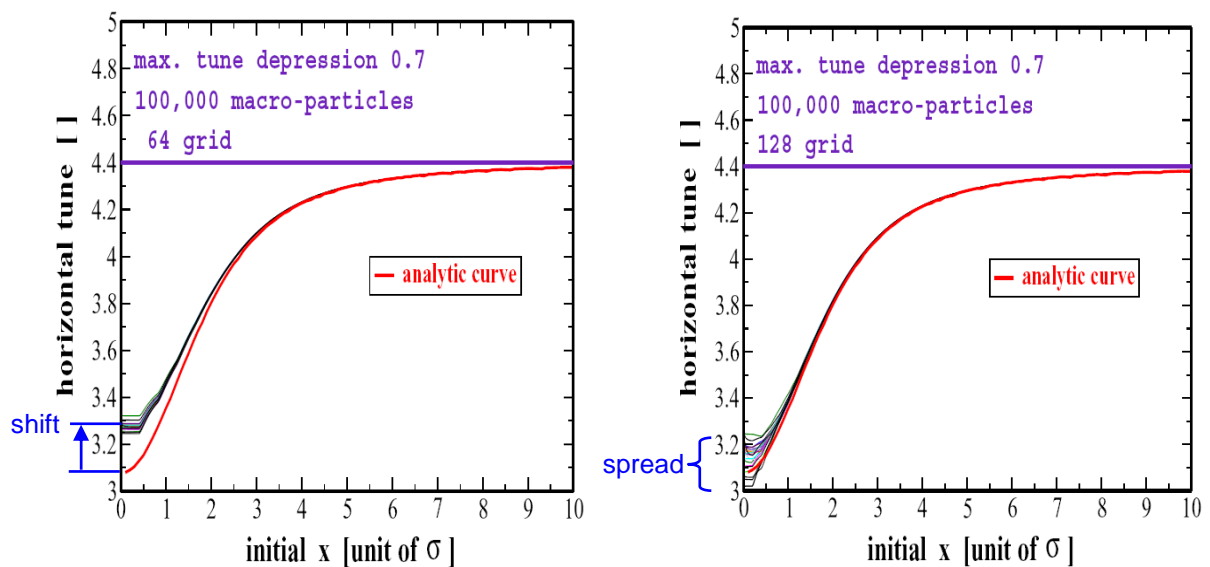
Fehler bei der numerischen Berechnung der Raumladungsfelder, wie im vorhergehenden Abschnitt vorgestellt, können zu einer falschen Berechnung der Tune-Depression führen und somit falsche Aussagen über das mögliche Auftreten von Resonanzeffekten implizieren.

Daher wurde ein weiterer Test im Rahmen der HIPPI-Kollaboration mit dem Ziel durchgeführt, einen quantitativen Vergleich zwischen numerisch berechneten Phasenvorschüben und einer analytischen Lösung anzustellen.

Hierfür wurde ein einzelnes Testteilchen mit den Anfangskoordinaten  $x \neq 0$ ,  $y = z = 0$  und  $p_x = p_y = p_z = 0$  durch einen in x-Richtung konstant fokussierenden Kanal mit dem Nullstrom-Phasenvorschub  $q_0$  befördert. Dabei wurde während der Oszillation des Testteilchens in der x-Ebene das statische  $E_x$ -Feld einer Gauß-Verteilung überlagert, welches vom Poisson-Solver des jeweiligen Simulationsprogramms auf dem kartesischen Gitter berechnet wurde. Je nach Anfangskoordinate  $x$  des Testteilchens sind dessen Oszillationsamplituden unterschiedlich, und somit auch die Wechselwirkung mit dem

Raumladungsfeld der Gauß-Verteilung. Folglich ergibt sich zu jedem  $x$ -Anfangswert  $x_{initial}$  ein anderer Phasenvorschub  $q$ , wie aus Abbildung 44 sichtbar. Im Falle der Simulationsprogramme wurden die einzelnen  $q(x_{initial})$ -Werte durch Fourier-Analyse der Testteilchen-Bahnen im Raumladungsfeld berechnet. Demgegenüber gibt es für die verwendete Gauß-Verteilung eine bekannte analytische Lösung, welche in Abbildung 44 in rot dargestellt ist. Darüber hinaus ist in Abbildung 44 der Nullstrom-Phasenvorschub als violette Linie eingetragen, also in diesem Fall  $q_0 = 4.4$ .

Anmerkung: An dieser Stelle wurde die Variablenbezeichnung  $q$  für den Phasenvorschub verwendet (sonst immer  $\sigma$  im Rahmen dieser Dissertation). Der Grund dafür ist zum einen, um mit der Nomenklatur der Referenz [1] konform zu sein und zum anderen, weil in Abbildung 44 der RMS-Radius mit  $\sigma$  bezeichnet wird.



**Abbildung 44 Einzelteilchen-Phasenvorschübe (englisch: „tune“) als Funktion des  $x$ -Anfangswerts eines Testteilchens in den Raumladungsfeldern von 20 verschiedenen Gauß-Verteilungen mit den RMS-Radien  $\sigma_x = \sigma_y = 4$  mm und  $\sigma_z = 8$  mm, gerechnet mit dem Programm IMPACT (Quelle: [1]).**

Wie am Beispiel aus Abbildung 44 ersichtlich, treten insbesondere für kleine  $\sigma$ -Werte, also im Zentrum der Raumladungswolke, zwei Effekte auf: Eine Verschiebung zwischen der numerisch ermittelten Phasenvorschub-Absenkung und der analytischen Vorhersage (Abbildung 44, links; im Folgenden „Tune-Shift“ genannt) sowie eine statistische Streuung der Ergebnisse für unterschiedliche Teilchenverteilungen (Abbildung 44, rechts; im Folgenden „Tune-Spread“ genannt).

Es gibt zwei Parameter, welche diese Effekte im Wesentlichen bestimmen: Die Makroteilchenzahl  $N_p$  sowie die Gitterauflösung  $\Delta x$ . Im Rahmen der HIPPI-Kollaboration wurde zunächst der Fehler  $\delta q$  als Differenz zwischen dem analytisch vorhergesagten Phasenvorschub  $q_A$  und dem von einem Simulationsprogramm numerisch bestimmten Wert  $q_C$  (jeweils abhängig vom  $x$ -Anfangswert  $x_{initial}$ ) definiert:

$$q_C = q_A + \delta q \quad ; \quad \delta q = \delta q(N_p, \Delta x)$$

Für  $\delta q$  wurde nach einem Skalierungsgesetz im Bunch-Zentrum ( $x = 0$ ) mit folgendem Ansatz gesucht [1,60]:

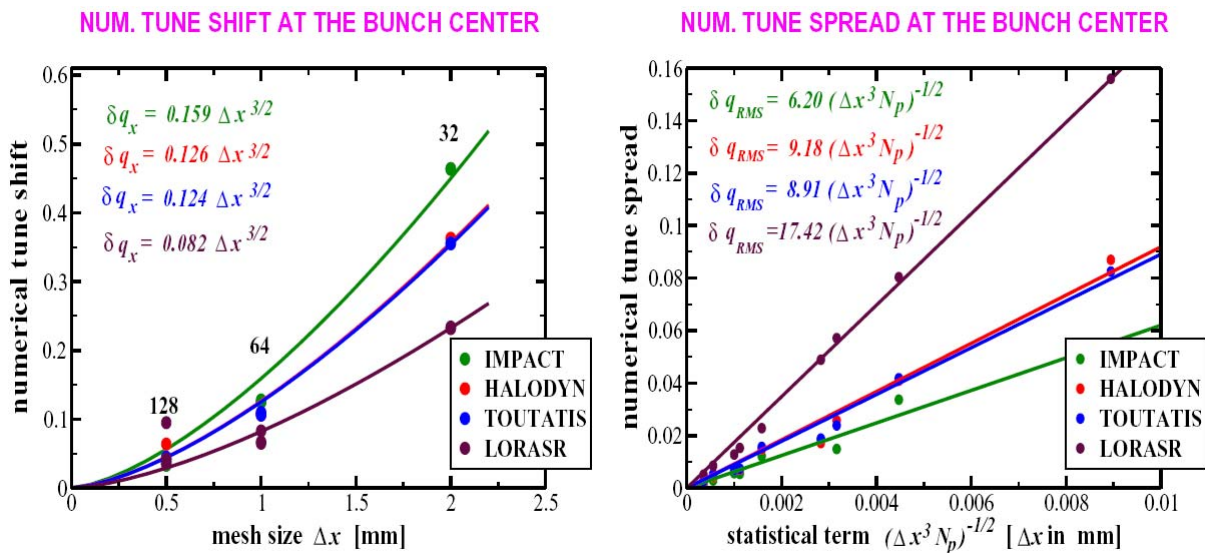
$$\delta q = K_1 \left( \frac{K_2(f_n, \text{Vol}_B)}{\sqrt{\Delta x^3 \cdot N_p}} + K_3(\text{Vol}_G, \text{Vol}_B) \cdot \Delta x^\alpha \right) \quad (5.3)$$

Dabei hängt die Konstante  $K_1$  nur von den äußeren Kräften (Fokussierungskanal),  $K_2$  von der Teilchenverteilung  $f_n$  und vom Bunch-Volumen  $\text{Vol}_B$  und schließlich  $K_3$  vom Bunch-Volumen  $\text{Vol}_B$  sowie vom Gitter-Volumen  $\text{Vol}_G$  ab.

Der erste Term aus Gleichung (5.3) wird wegen der  $(\Delta x^3 \cdot N_p)^{-1/2}$ -Abhängigkeit von der Teilchenzahl pro Gitterzelle bestimmt und ist daher statistischer Natur, d.h. dieser Term bestimmt im Wesentlichen den Tune-Spread. Der zweite Term hat eine  $\Delta x^\alpha$ -Abhängigkeit, wird also nur von der Gitterauflösung bestimmt und charakterisiert folglich die Diskretisierungsfehler, welche den beobachteten Tune-Shift zur Folge haben.

Um beide Effekte quantitativ zu beschreiben, wurden jeweils 20 statistisch variierte Gauß-Verteilungen (alle mit gleichen RMS-Größen  $\sigma_x = \sigma_y = 4$  mm und  $\sigma_z = 8$  mm) mit den Teilchenzahlen  $10^5$ ,  $4 \times 10^5$  und  $10^6$  generiert. Zur Berechnung der Raumladungsfelder wurden zusätzlich die Gitterzahlen variiert, und zwar  $32^3$ ,  $64^3$  und  $128^3$ . Dadurch wurden insgesamt  $20 \times 3 \times 3 = 180$  Fälle unterschieden. Zu jeder der 180 Kombinationsmöglichkeiten wurde eine je nach Teilchenzahl bis zu 100 MByte große Ausgabedatei erzeugt. Somit gehörte dieser Test zu den arbeits- und speicherintensivsten Aktivitäten innerhalb der HIPPI-Kollaboration, wodurch sich die begrenzte Anzahl der beteiligten Programme vielleicht erklären lässt.

Die Ergebnisse lassen sich jedoch umso kompakter darstellen, wie in Abbildung 45 zu sehen: Im Tune-Spread-Graphen auf der rechten Seite kann man für jedes Simulationsprogramm je 9 Punkte erkennen, welche sich aus der Kombination 3 Teilchenzahlen  $\times$  3 Gitterzahlen ergeben. Es ist jedoch zu beachten, dass zur Generierung eines jeden Punktes in der Grafik 20 verschiedene Gauß-Verteilungen verwendet wurden! Das Gleiche gilt für den Tune-Shift-Graphen, wobei dort die Punkte für verschiedene Teilchenzahlen meistens übereinander liegen.



**Abbildung 45** Numerischer Tune-Shift (links) und Tune-Spread (rechts) im Bunch-Zentrum, sowie interpolierte Werte der Konstanten  $K_2$  und  $K_3$  aus Gleichung (5.3) (Quelle: [1]).



Die Konstanten  $K_2$  und  $K_3$  wurden durch Kurvenanpassung an die Ergebnisdaten für jedes Simulationsprogramm bestimmt. Die Zahlenwerte werden in Abbildung 45 angegeben. Zusätzlich wurde für den Koeffizienten  $\alpha$  im  $\Delta x^\alpha$ -abhängigen Term von Gleichung (5.3) der Wert  $\alpha = 1.5$  empirisch ermittelt.

Die Konstanten  $K_2$  und  $K_3$  sind ein Maß für die Qualität des Raumladungssolvers, d.h. je kleiner sie sind, umso genauer ist der Solver.

In diesem Kontext lassen sich die Ergebnisse des Phasenvorschub-Tests wie folgt zusammenfassen:

- Der statistisch bedingte Tune-Spread ist für die Kombination wenig Teilchen (hier  $10^5$ ) und feines Gitter (hier  $128^3$ ) am größten und fällt in der Darstellung  $\delta q \left( (\Delta x^3 \cdot N_p)^{-1/2} \right)$  linear ab (vergl. Abbildung 45 rechts). Dabei zeigt das Programm LORASR den größten und das Programm IMPACT den kleinsten Tune-Spread.
- Der Tune-Shift ist für das gröbste  $32^3$  – Gitter am größten und fällt, wie bereits erwähnt, mit  $\Delta x^{-1.5}$  ab, wobei die Teilchenzahl so gut wie keine Rolle spielt. Hier sind die Verhältnisse umgekehrt, d.h. LORASR zeigt den kleinsten und IMPACT den größten Tune-Shift.
- Es zeigt sich also, dass man den statistischen und den geometrischen Anteil des Fehlers  $\delta q$  nicht gleichzeitig reduzieren kann, wobei nicht geklärt werden konnte, wie die beobachteten Unterschiede zwischen den Solvern entstehen. Im Falle von LORASR könnte die NGP-Methode (vergl. Kapitel 4.2.3) eine hohe statistische Fluktuation und somit einen erhöhten Tune-Spread verursachen. Um diese Vermutung zu überprüfen, könnte in LORASR ein Algorithmus implementiert werden, welcher die CIC-Methode zur Diskretisierung der Ladungsverteilung auf dem Gitter verwendet.

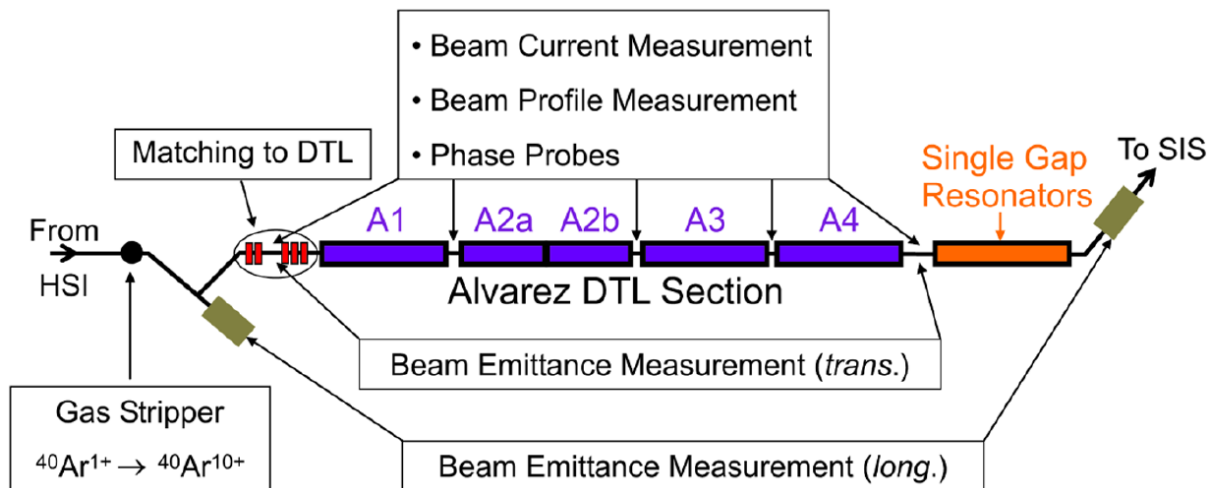
### 5.3. Vergleich von Teilchensimulationsrechnungen am Beispiel des GSI UNILAC-Alvarez-Abschnittes

Der letzte und weitest reichende Test innerhalb der HIPPI-Kollaboration bestand darin, nicht nur die Poisson-Solver untereinander zu vergleichen, sondern die „globalen“ Strahldynamik-Ergebnisse der beteiligten Simulationsprogramme am Beispiel des GSI UNILAC-Alvarez-Abschnittes.

Die Hauptkomponenten des ca. 54 m langen Beschleunigerabschnitts sind fünf eigenständige Resonatoren vom Alvarez-Typ, wie in Abbildung 46 schematisch dargestellt (die Tanks A2a und A2b bilden eine gemeinsame Kavität) sowie zwei Rebuncher (zwischen A2a und A2b sowie zwischen A3 und A4). Die Anordnung besteht aus insgesamt 192 HF-Gaps mit den Sollphasen  $\varphi_s = -30^\circ$  (in A1 und A2) bzw.  $\varphi_s = -25^\circ$  (in A3 und A4), welche den UNILAC-Strahl von 1.4 MeV/u auf 11.4 MeV/u beschleunigen. Jede Alvarez-Driftröhre beherbergt eine magnetische Quadrupollinse. Die Polarität des Fokussierungskanals ist F-D-D-F, mit Ausnahme der Zwischentankbereiche, in welchen sich Tripletlinsen mit F-D-F Fokussierung befinden.

Zur Komplexität des GSI Alvarez-Beschleunigers als „Prüfstand“ für den HIPPI-Programmvergleich trägt nicht nur die große Anzahl an Komponenten bei, sondern auch die Tatsache, dass dieser UNILAC-Abschnitt ursprünglich nicht für den Hochstrombetrieb ausgelegt wurde. Wie die Simulationen und auch die HIPPI-Messkampagnen gezeigt haben, gibt es zwei Problembereiche, welche Emittanzwachstum bis hin zu Teilchenverlusten verursachen und somit die Bedingungen für die Vergleichbarkeit der Ergebnisse erschwert haben:

- Die Zwischentankbereiche verursachen einen „Mismatch“, d.h. die durch die Quadrupol-Triplets und Buncherkavitäten eingestellten Strahlparameter sind nicht optimal für den Einschuss in die jeweils folgende Alvarez-Struktur.
- Der zurzeit im UNILAC-Standardbetrieb verwendete Nullstrom-Phasenvorschub ist nicht optimal: Es konnte experimentell gezeigt werden [61], dass sich bei einer Erhöhung auf  $\sigma_0 = 60^\circ$  durch stärkere Quadrupolfelder in den Alvarez-Driftröhren das Emittanzwachstum wesentlich reduzieren lässt.



**Abbildung 46** Schematischer Aufbau des GSI UNILAC Alvarez-Abschnittes mit Kennzeichnung der Position der Meßaufbauten für die Emittanzmessungen im Rahmen der Maschinenexperimente für HIPPI (Quelle: [61]).

Der GSI UNILAC-Alvarez-Vergleich fand, wie bereits erwähnt, in folgenden Schritten statt:

- Simulationsrechnungen mit „Nullstrom“, um die Eingabedatensätze der verschiedenen Programme möglichst gut aufeinander abzustimmen, auch um mögliche Unterschiede bei der Modellierung der HF-Gapfelder und der Quadrupollinsen zu untersuchen.
- Simulationsrechnungen mit einem 37.5 mA,  $^{238}\text{U}^{28+}$  Teststrahl und einer angenommenen 6D-Gaußverteilung [1].
- Vergleich der Simulationsergebnisse mit den am Eingang sowie am Ausgang des Alvarez-Beschleunigerabschnittes (vergl. Abbildung 46) gemessenen Teilchenverteilungen eines 7.1 mA,  $^{40}\text{Ar}^{10+}$  Strahls [61].

Nachfolgend werden die wesentlichen Ergebnisse vorgestellt, mit besonderem Augenmerk auf das Abschneiden des LORASR-Programms.

### Simulationsrechnungen mit „Nullstrom“

Für die „Nullstrom“-Vergleichsrechnungen wurde eine nicht angepasste sphärische 6D-Gauß-Verteilung mit  $10^4$  Teilchen und folgenden Parametern verwendet:  $\sigma_{x,y,z} = 2 \text{ mm}$  ( $\sigma_{\delta\phi} = 4.7^\circ$ ),  $\sigma_{x',y',z'} = 2 \text{ mrad}$  ( $\sigma_{\delta W} = 1.3 \text{ MeV}$ ). Diese stellt einen  $^{238}\text{U}^{28+}$  Strahl von geringer Intensität und der Energie  $W = 1.4 \text{ MeV/u}$  am Einschuss in den ersten Alvarez-Tank des UNILACs dar.

Hauptzielsetzung dieser Untersuchung war, die Eingabedaten der beteiligten Programme (Gapspannungen, Linsengradienten, geometrische Längen usw.) sowie die daraus berechneten Parameter (z.B. den Energiegewinn für jede Zelle) möglichst gut in Übereinstimmung zu bringen, damit sichergestellt ist, dass eventuelle Unterschiede in den Teilchensimulationsergebnissen nicht auf unterschiedliche physikalische Modelle zurückzuführen sind.

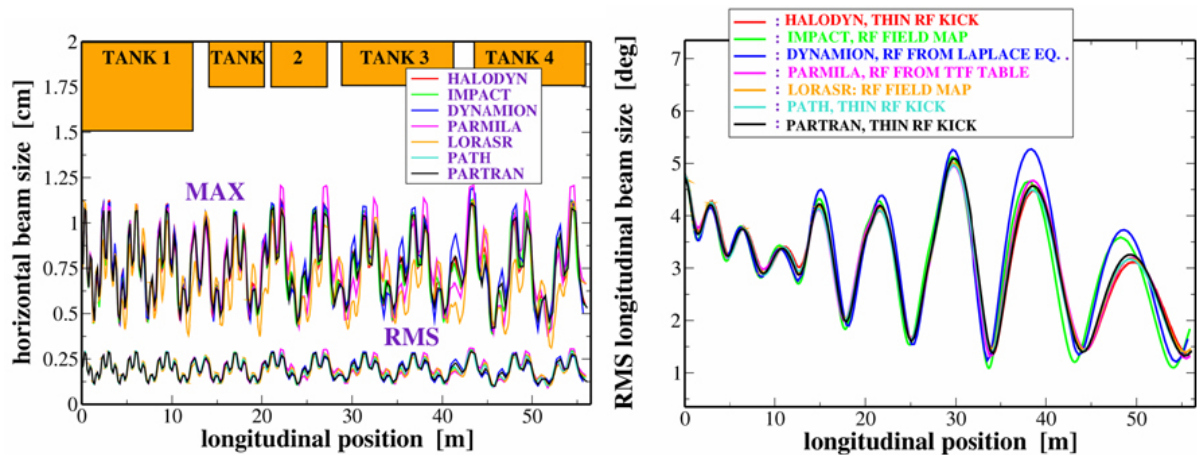
Die Transformation der Einzelteilchenkoordinaten in den Beschleunigungsspalten ist wegen der unterschiedlichen Modellierung der HF-Gapfelder eine der Hauptquellen für Abweichungen bei Simulationen mit Nullstrom. Für die an der HIPPI-Kollaboration beteiligten Programme gibt es folgende Unterschiede (weitere Details findet man in [1] sowie in den Referenzen zum jeweiligen Programm):

- PARMILA [65] und IMPACT [64] verwenden die mit „Poisson Superfish“ [69] berechneten Gapfelder und Transit-Time-Faktoren (Definition gemäß Gleichung (2.8)).
- DYNAMION [62] löst zunächst die Laplace-Gleichung numerisch mit der Finite-Elemente-Methode, unter Berücksichtigung der genauen Driftröhrengometrie und unter der Annahme von Zylindersymmetrie. Anschließend wird das  $U(r,z)$ -Potential in einer Reihenentwicklung (mit 30 Koeffizienten) angenähert.
- HALODYN [63] berechnet die Änderungen der radialen und longitudinalen Teilchenimpulse als einzelnen „Kick“ in der Spaltmitte („Dünnes-Gap“), so zum

$$\text{Beispiel } \Delta p_r = -\frac{\pi q r}{\gamma^2 \beta^2 c \lambda} \cdot \sin(\varphi_s) \cdot U_0 \cdot T \text{ (vergl. Gleichung (2.67)).}$$

- PATH und PARTRAN [66] importieren mit numerischen Simulationstools wie z.B. CST Microwave Studio® [16] berechnete 3D – Feldverteilungen.
- LORASR verwendet die in Kapitel 3.2.1 beschriebene parametrische Eingabe der Spaltfeldverteilung für 10 verschiedene Spaltgeometrien mit linearer Näherung der  $E_z(z,r)$ -Verläufe.

Angesichts dieser zum Teil sehr unterschiedlichen Ansätze zur Modellierung der Gapfelder ist der erzielte Grad der Übereinstimmung, wie aus Abbildung 47 ersichtlich, als gut bis sehr gut zu bewerten: Die Verläufe der transversalen sowie longitudinalen RMS-Strahlradien stimmen sehr gut überein. Die X(Z) 100%-Strahlenveloppen zeigen etwas deutlichere Abweichungen, insbesondere nach dem Ausgang des Alvarez-Tanks A2b.



**Abbildung 47** Beispiel für die erzielte Übereinstimmung in den HIPPI-Simulationen mit „Nullstrom“: Horizontale 100% - und RMS-Strahlenveloppen (links), sowie longitudinale RMS-Strahlenveloppen (rechts) (Quelle: [1]).

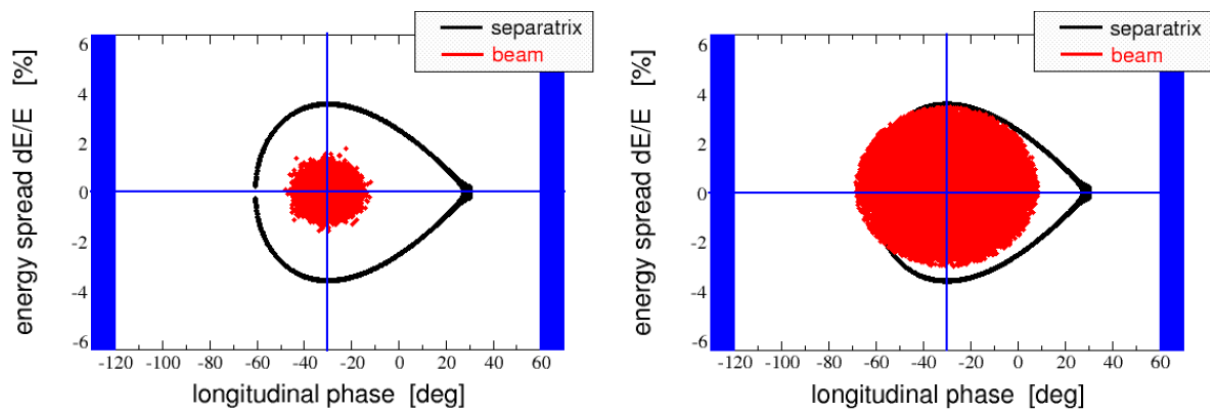
## Simulationsrechnungen mit einem 37.5 mA, $^{238}\text{U}^{28+}$ Teststrahl

Nach der Abstimmung der Eingabedatensätze der beteiligten Programme mit „Nullstrom“ wurde im nächsten Schritt die Raumladungskraft mit einbezogen, indem Simulationen mit einer nicht angepassten sphärischen 6D-Gauß-Verteilung und  $10^6$  Teilchen durchgeführt wurden.

Als Referenzstrom für den Hochstrombetrieb des UNILAC wurden 12.5 mA  $^{238}\text{U}^{28+}$  gewählt (über eine HF-Periode gemittelt, vergl. Gleichung (4.4) und Abbildung 33). Da jedoch der „Prestripper“-Bereich des GSI-UNILAC eine Betriebsfrequenz von  $f = 36.136$  MHz hat und demgegenüber der Alvarez-Abschnitt bei  $f = 108.408$  MHz betrieben wird, wurde in den Simulationen ein Strahlstrom von 37.5 mA verwendet (nur jede dritte Zelle des Alvarez-Beschleunigers ist mit einem Microbunch gefüllt).

Es wurden zwei Fälle untersucht, welche sich nur in den longitudinalen Strahlparametern unterscheiden, wie aus Abbildung 48 ersichtlich, und zwar:

- Für „Fall 1“ ist  $\sigma_{x,y,z} = 1.75$  mm ( $\sigma_{\delta\phi} = 4.15^\circ$ ) und  $\sigma_{x',y',z'} = 1.75$  mrad ( $\sigma_{\delta W/W} = 0.35\%$ ). Die longitudinale Teilchenverteilung befindet sich dabei am Eingang in den ersten Alvarez-Tank vollständig innerhalb der Separatrix (Abbildung 48, links).
- Für „Fall 2“ sind die transversalen RMS-Radien wie für Fall 1 und für die longitudinalen Parameter gilt  $\sigma_{\delta\phi} = 12.4^\circ$  und  $\sigma_{\delta W/W} = 1.05\%$ . Die longitudinale Teilchenverteilung füllt die Separatrix aus und überschreitet diese teilweise (Abbildung 48, rechts).

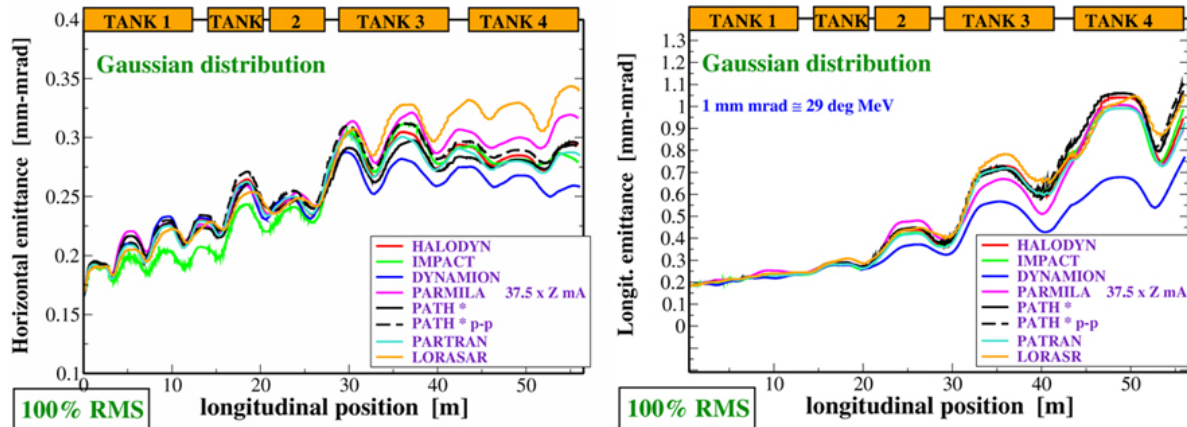


**Abbildung 48** Vergleich der longitudinalen Phasenraum-Verteilungen für die HIPPI-Simulationen mit einem 37.5 mA,  $^{238}\text{U}^{28+}$  Teststrahl: „Fall 1“ (links), „Fall 2“ (rechts) (Quelle: [1]).

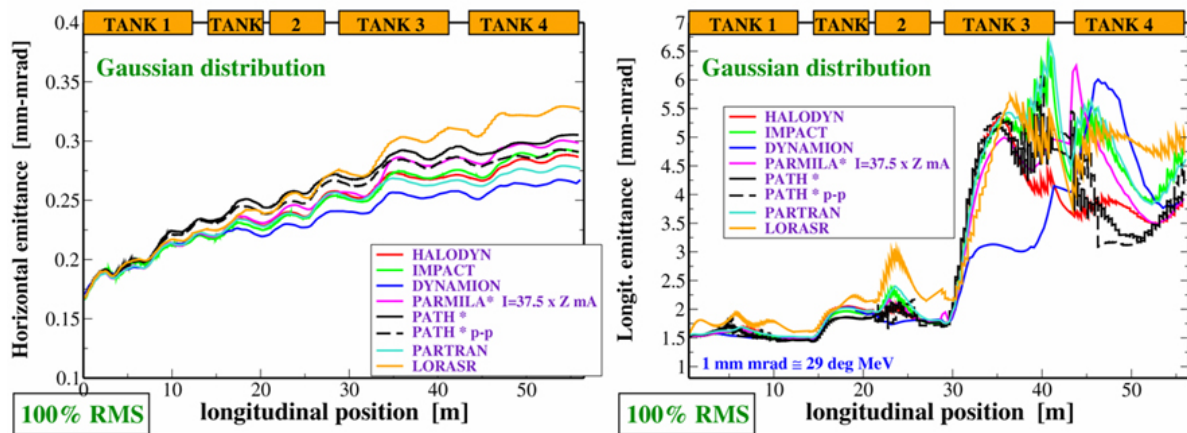
Durch diese Fallunterscheidung sollten die Auswirkungen folgender Randbedingungen auf die Simulationsergebnisse näher untersucht werden:

- Für den longitudinal „kurzen“ Bunch von Fall 1 gilt bei  $I = 37.5$  mA eine „Phasenvorschub-Absenkung“ (englisch: „Tune-Depression“) von  $q/q_0 = 0.35$ . Damit ist die longitudinale Strahldynamik im Fall 1 stark raumladungsdominiert, d.h. alle beobachteten Effekte (z.B. das Emittanzwachstum) sowie mögliche Unterschiede zwischen den Ergebnissen der beteiligten Simulationsprogramme sind in erster Linie auf Raumladungseffekte zurückzuführen.
- Im Fall 2 gilt lediglich eine longitudinale Tune-Depression  $q/q_0 = 0.88$ . Dafür wird der Bereich stabiler Teilchenbewegung im longitudinalen Phasenraum ausgefüllt und sogar leicht überschritten. Damit ist die longitudinale Strahldynamik im Fall 2 von nichtlinearen Effekten bei der Gap-Transformation (wegen der großen Phasenbreite des Bunches) sowie von Teilchenverlusten geprägt.

In Abbildung 49 und Abbildung 50 werden wesentliche Ergebnisse der vorliegenden Benchmarking-Kampagne innerhalb der HIPPI-Kollaboration exemplarisch vorgestellt. Für eine detaillierte Darstellung der Ergebnisse wird auf die Referenzen [1], [70] und [71] hingewiesen.



**Abbildung 49** Vergleich der normierten RMS-Emittanzen für „Fall 1“ (Quelle: [1]).



**Abbildung 50** Vergleich der normierten RMS-Emittanzen für „Fall 2“ (Quelle: [1]).

In beiden Fällen zeigt sich bei der horizontalen normierten RMS-Emittanz eine starke Streuung der Ergebnisse, welche im Fall 1 insbesondere nach dem Ausgang des Alvarez-Tanks A2b herausbildet (Abbildung 49, links). Die vertikale normierte RMS-Emittanz (hier nicht gezeigt, vergl. [1] oder [70]) stimmt viel besser überein, und zwar beträgt die maximale Streuung der Ergebnisse ca. 5 % am Ende des UNILAC Alvarez-Abschnittes.

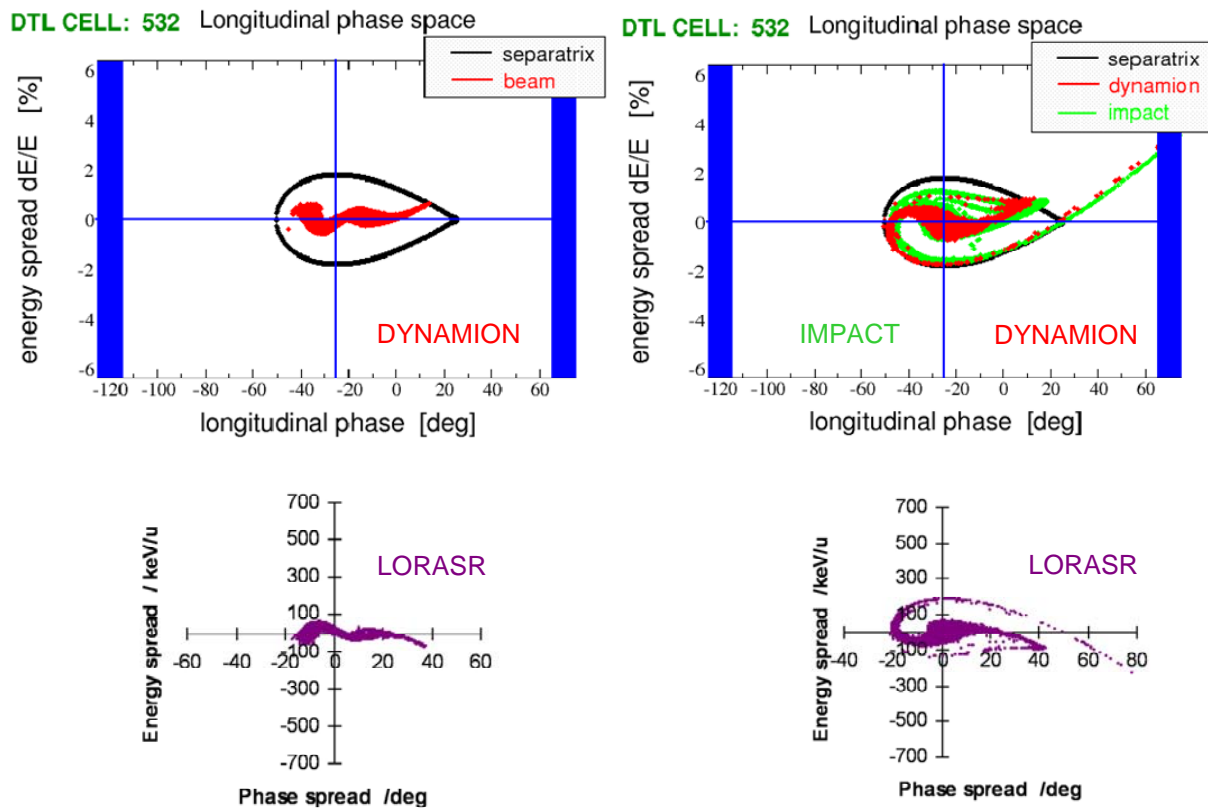
Trotz der beobachteten Unterschiede in den Absolutwerten der normierten RMS-Emittanzen ist positiv zu vermerken, dass die Kurvenverläufe gleiche Strukturen aufweisen. Dies ist ein Hinweis, dass sich die Transformationen der Teilchenkoordinaten im Kern der transversalen Phasenraumverteilungen für alle beteiligten Programme gut vergleichen lassen, so dass sich die Ergebnisse lediglich in der Behandlung der äußersten Randteilchen („Halo“-Teilchen) unterscheiden. Einzelne Halo-Teilchen tragen wegen ihrer extremen Koordinatenwerte überproportional zum Zahlenwert der RMS-Emittanz bei und verursachen somit die beobachtete Streuung der Ergebnisse.

Beim Vergleich der Verläufe der longitudinalen normierten RMS-Emittanz gibt es wesentliche Unterschiede zwischen Fall 1 und Fall 2:

Im Fall 1 ist das Emittanzwachstum ausschließlich auf die Raumladungskraft zurückzuführen,



da die longitudinale Teilchenverteilung durchgehend innerhalb der Separatrix verbleibt (vergl. Ausgangsverteilung gemäß Abbildung 51, links) und es keine Teilchenverluste gibt. Im Fall 2 ist das Emittanzwachstum wegen der großen Phasenbreite des Strahls zusätzlich auf die nichtlinearen Effekte der HF-Felder zurückzuführen. Außerdem nimmt die Teilchenverteilung den gesamten verfügbaren Raum innerhalb des Separatrix ein. Zusätzlich wird am Eingang vom Alvarez-Tank A3 die Sollphase von  $\varphi_s = -30^\circ$  auf  $\varphi_s = -25^\circ$  reduziert (und somit auch die Separatrix-Fläche). Dies führt zu einem starken Emittanzwachstum im Tank A3 und schließlich zu Teilchenverlusten. Diese beginnen bei  $Z \approx 35$  m in der Mitte vom Tank A3 und sind daran zu erkennen, dass die RMS-Emittanzwerte jeweils kurz abfallen, um danach wieder anzusteigen. Jede Reduktion der Emittanz kommt dadurch zustande, dass die Koordinaten der „verlorenen“ Teilchen nicht mehr zur Berechnung des RMS-Wertes herangezogen werden. Der Anstieg unmittelbar danach ist durch weitere Teilchen außerhalb der Separatrix bedingt, welche den in Abbildung 51 rechts erkennbaren „Schweif“ immer von Neuem befüllen. Wegen der Teilchenverluste können die Verläufe der longitudinalen RMS-Emittanzen nicht mehr miteinander verglichen werden, zumal auch unterschiedliche Verlustanteile vorausgesagt werden (zwischen 1.3% für PATH und 2.2 % für HALODYN).



**Abbildung 51** Vergleich der longitudinalen Ausgangsverteilungen für „Fall 1“ (links) sowie für „Fall 2“ (rechts).

Trotz dieser scheinbar gravierenden Diskrepanzen muss resümiert werden, dass die RMS-Emittanz die in Bezug auf Halo-Bildung empfindlichste Messgröße darstellt und der Vergleich anderer Kenngrößen wie z.B. der Strahlradien zu einer weit besseren Übereinstimmung führt.

Gleiches gilt für die longitudinalen Ausgangsemittanzen, wie der Vergleich zwischen DYNAMION, IMPACT und LORASR aus Abbildung 51 zeigt: Man erkennt jedes Detail in der Filamentierung des Strahls wieder, nachdem dieser durch einen 54 m langen

Beschleunigerabschnitt mit 192 HF-Gaps transformiert wurde! Die Darstellung ist lediglich spiegelverkehrt, wegen der unterschiedlichen  $dE/E$  Definition.

### Vergleich zwischen Simulation und Messung für einen 7.1 mA, $^{40}\text{Ar}^{10+}$ Strahl

Als letzter Meilenstein des HIPPI-Benchmarking-Programmes wurden im Rahmen dedizierter Strahlzeiten am GSI-UNILAC Hochstrom-Maschinenexperimente durchgeführt und die gemessenen Strahlparameter mit den Ergebnissen verschiedener Simulationsprogramme verglichen.

Die dazugehörigen Messkampagnen fanden größtenteils im Jahre 2006 statt und werden in den Referenzen [72] und [61] ausführlich beschrieben. Dank der HIPPI-Kollaboration war es möglich, ausgedehnte Strahlzeiten für Maschinenexperimente am „Arbeitspferd“ der GSI zugesprochen zu bekommen. Die Ergebnisse dieser Aktivität sind aber nicht nur von „akademischem“ Interesse, sondern lieferten wertvolle Informationen zur Verbesserung der Strahlanpassung entlang des Alvarez-Abschnittes für den Hochstrombetrieb.

Da es zum Zeitpunkt des HIPPI-Benchmarkings keinen Uranstrahl von ausreichender Intensität gab, wurden sämtliche Messungen mit einem 7.1 mA,  $^{40}\text{Ar}^{10+}$  Strahl am Eingang des Alvarez-Beschleunigerabschnittes durchgeführt. Dieser ist im Hinblick auf die Wirkung der Raumladungskraft äquivalent zu einem 15 mA,  $^{238}\text{U}^{28+}$  Strahl, welcher eine Mindestanforderung für den FAIR-Hochstrombetrieb darstellt. Wegen des kleineren  $A/q$  – Verhältnisses des  $^{40}\text{Ar}^{10+}$  Strahls reichten die maximalen Quadrupolgradienten der eingebauten Linsen aus, um Nullstrom-Phasenvorschübe  $\sigma_0 = 90^\circ$  und größer zu erzielen.

Der verwendete Messaufbau wurde bereits in Abbildung 46 schematisch dargestellt. Die Vorgehensweise war wie folgt:

- Messung der transversalen Emittanzen mit einem Schlitz-Gitter-Aufbau kurz vor dem Einschuss in den Alvarez-Tank A1 (vergl. Abbildung 46 sowie Ref. [72] und [61]).
- Messung der longitudinalen RMS-Bunchlänge hinter dem Gas-Stripper.
- Variation der Feldstärken der Alvarez-Quadrupole, um die resultierenden Nullstrom-Phasenvorschübe zwischen  $\sigma_0 = 35^\circ$  und  $\sigma_0 = 90^\circ$  einzustellen. Dies entspricht einer Tune-Depression zwischen  $\sigma/\sigma_0 = 0.57$  bei  $35^\circ$  und  $\sigma/\sigma_0 = 0.79$  bei  $90^\circ$ .
- Messung der horizontalen und vertikalen Emittanz mit einem Schlitz-Gitter-Aufbau direkt hinter dem Alvarez-Tank A4 sowie des Strahlstromes (und somit der globalen Transmission zwischen 1.4 und 11.4 MeV/u).

Ein besonderes Augenmerk wurde auf die Rekonstruktion der Teilchenverteilung vor dem Alvarez-Tank A1 gerichtet, um die Eingangsbedingungen für die Simulationsprogramme den experimentellen Bedingungen möglichst gut anzupassen.

Zunächst wurden für die Generierung der Phasenraum-Dichteverteilungsfunktion  $f = f(x, x', y, y', z, z')$  gängige Verteilungen wie z. B. Gauss, Lorentz, Waterbag oder KV angesetzt. Eine Analyse der fraktionellen RMS-Emittanzen zeigte jedoch, dass keine der obengenannten „Standard“-Verteilungen die gemessenen transversalen Dichteverteilungen genau beschreiben.

Deshalb wurde  $f$  empirisch bestimmt, von folgendem Ansatz ausgehend [61]:

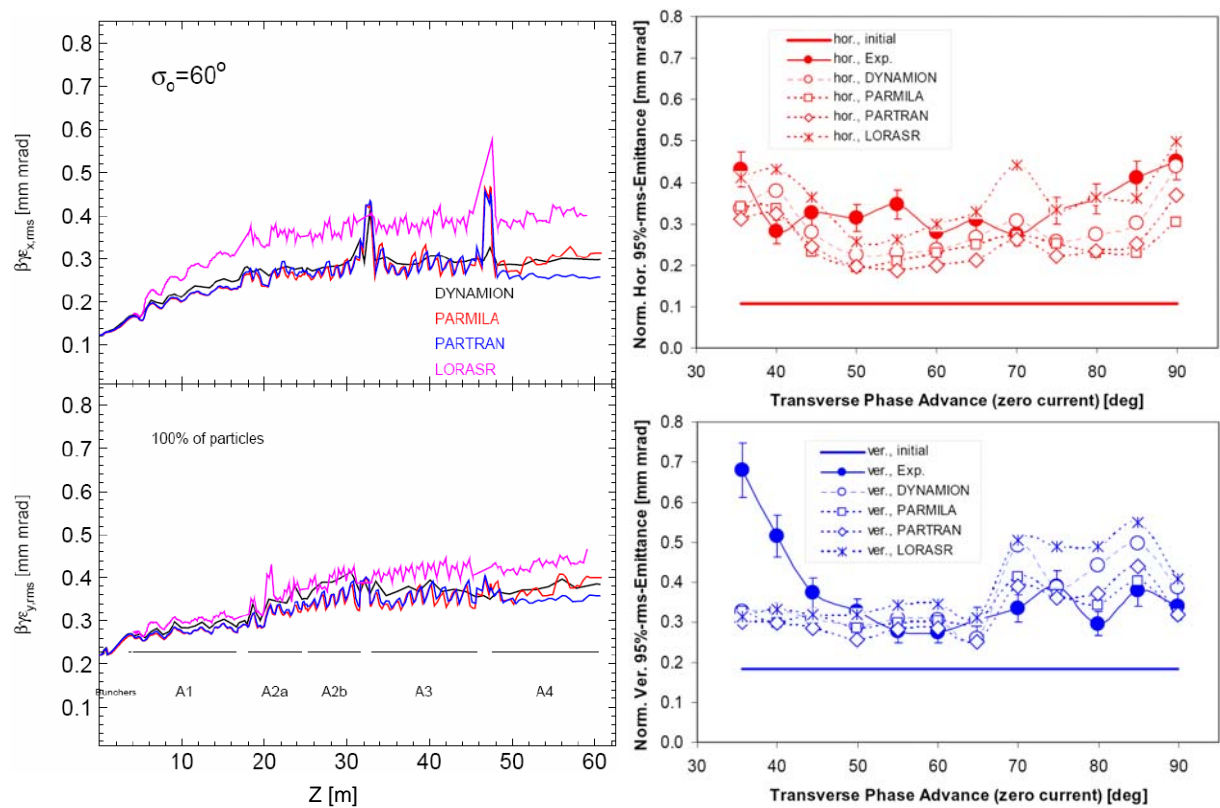
$$f(\tilde{R}) = \frac{a}{2.5 \times 10^{-4} + \tilde{R}^{10}} \quad (5.4)$$

Wobei  $\tilde{R}$  der generalisierte Radius im 6-dimensionalen Phasenraum ist.

Mit dem Ansatz aus Gleichung (5.4) wurden Teilchenverteilungen mit  $N_p = 2 \times 10^5$  Teilchen

generiert und von allen am Benchmarking beteiligten Programmen als Eingangsparameter verwendet. Eine Ausnahme bildete das Programm DYNAMION mit  $N_P = 4.3 \times 10^3$ .

Diesmal wurden für die Benchmarking-Simulationen die Programme DYNAMION [62], PARMILA [65], PARTRAN [66] und LORASR [Kapitel 3.2] hinzugezogen. Eine ausführliche Beschreibung aller Benchmarking-Ergebnisse findet man in der Referenz [61]. Da der Vergleich mit den LORASR-Ergebnissen erst später durchgeführt wurde und zunächst Unstimmigkeiten aufzuklären waren, wird dieses Programm in Referenz [61] noch nicht erwähnt. Die Ergebnisse wurden aber bereits während der HIPPI-Kollaborationstreffen vorgestellt und können ebenfalls veröffentlicht werden. Abbildung 52 sowie Abbildung 53 dienen zur Veranschaulichung und Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse.



**Abbildung 52** Vergleich der normierten transversalen 100% RMS-Emittanzen entlang des GSI Alvarez-Beschleunigers für den Nullstrom-Phasenvorschub  $\sigma_0 = 60^\circ$  (links) sowie der normierten 95% Ausgangsemittanzen für verschiedene Nullstrom-Phasenvorschübe.

Der Verlauf der 100% normierten RMS-Emittanzen (Abbildung 52, links) stimmt bei den meisten Programmen sehr gut überein. Nur LORASR sagt ein größeres Emittanzwachstum voraus, wobei es sich um ein „Offset“ der Absolutwerte handelt und die Kurvenverläufe ansonsten gleiche Strukturen aufweisen. Ähnliches wurde schon beim früheren HIPPI-Programmvergleich (Abbildung 49 und Abbildung 50) beobachtet, und ist auf Einzelteilcheneffekte der Halo-Teilchen zurückzuführen.

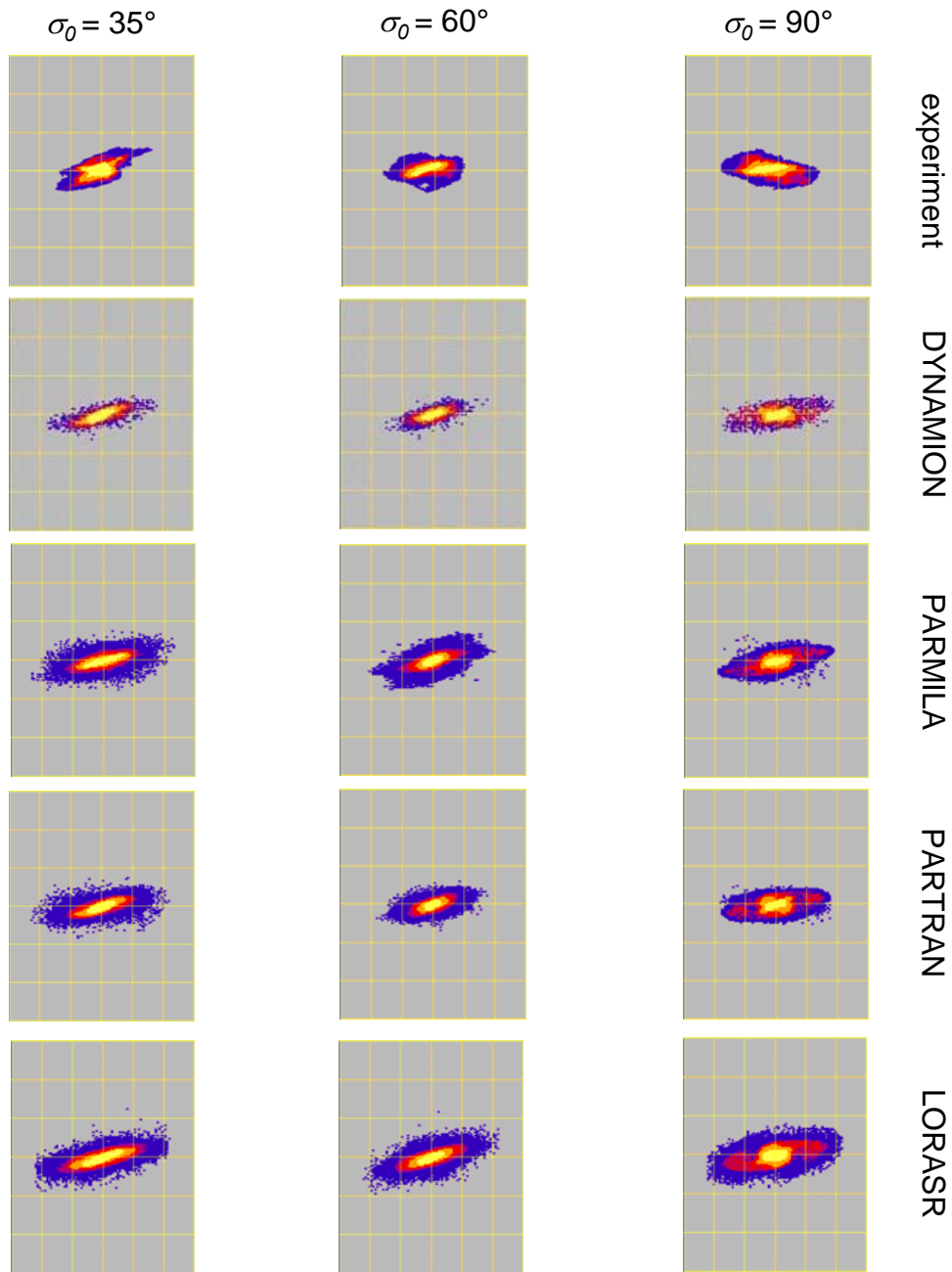
Diese Aussage wird durch Abbildung 53 bestätigt: Hier erkennt man eine sehr gute Übereinstimmung zwischen allen Simulationsprogrammen für verschiedene Nullstrom-Phasenvorschübe. Dagegen gibt es deutliche Unterschiede zwischen Messung und Simulation, sowohl in Abbildung 53 als auch in Abbildung 52 rechts zu erkennen: Die gemessenen Ausgangsverteilungen weisen deutlich unterschiedliche Strukturen auf, wie auch die Verläufe der normierten transversalen 95% RMS-Emittanzen für verschiedene



Phasenvorschübe. Dagegen stimmen die Kurvenverläufe der Simulationsprogramme recht gut überein und haben z.B. ein lokales Maximum bei  $\sigma_0 = 70^\circ$  in der horizontalen Ebene.

Die beobachteten Unterschiede zwischen Messung und Simulation sind noch nicht vollständig verstanden. Es wird vermutet, dass es Abweichungen des reellen Beschleunigers von den in der Simulation verwendeten Parametern gibt (z.B. Quadrupol-Gradientenabweichungen, Justagefehler usw.), welche für diese Diskrepanz verantwortlich sind.

Trotz alledem weisen sowohl alle Simulationsergebnisse als auch die Messungen ein minimales Emittanzwachstum im Intervall  $\sigma_0 \in [50^\circ, 60^\circ]$  auf. Dieses Ergebnis hat dazu beigetragen, künftig den Arbeitspunkt des GSI-UNILAC-Alvarezabschnittes auf  $\sigma_0 = 60^\circ$  für den Hochstrombetrieb zu erhöhen.



**Abbildung 53** Vergleich der Teilchenverteilungen in der X-X' Ebene am Ausgang des GSI Alvarez-Beschleunigers für drei verschiedene Nullstrom-Phasenvorschübe.

## 6. Simulation und Analyse von Justage- und Feldfehlern

### 6.1. Motivation der Simulation von Maschinenfehlern und Klassifizierung der Fehlerarten

Zu den bedeutendsten Kriterien bei der strahldynamischen Auslegung von Linearbeschleunigern mit hoher Strahlintensität zählt die Minimierung der Strahlverluste, um eine Aktivierung oder Beschädigung von Beschleunigerkomponenten zu vermeiden. Insbesondere für Anlagen mit hoher mittlerer Strahlleistung (sogenannte „Multi-Megawatt-Anlagen“, vergl. Kapitel 4.1, Abschnitt „Definition des Strahlstroms und der Strahlleistung“) ist für die lokal deponierte Strahlverlustleistung  $P_{\text{loss}}$  eine Höchstgrenze von 1 W/m festgelegt worden [73]. Dieser konservative Wert darf jedoch in vielen Fällen deutlich überschritten werden, insbesondere im Niederenergiebereich. Der Grenzwert von 1 W/m soll bei mittleren bis hohen Strahlenergien (ab mehreren MeV) sicherstellen, dass die Restdosis der aktivierten Komponenten nach einer Betriebszeit von 30 Tagen mit anschließender Wartezeit von 4 Stunden weniger als 1 mSv/h beträgt, so dass Wartungsarbeiten am Beschleuniger kurz nach dessen Abschaltung möglich sind („Hands on Maintenance“).

Bei vielen aktuellen Designs hochintensiver Protonen- bzw. Ionenbeschleuniger wurde die Einhaltung des 1 W/m Verlustlimits am Hochenergieende als Designkriterium verwendet. Bei mittleren Strahlleistungen zwischen 1 und 10 MW ergeben sich daraus maximal zulässige Verlustanteile von der Größenordnung  $10^{-6}$  bis  $10^{-7}$ . Um die Verteilung der Verluste genau quantifizieren zu können, muss das verwendete Rechenprogramm über entsprechende Auswertefunktionen verfügen.

Hinzu kommt, dass im realen Beschleuniger sogenannte „Maschinenfehler“ wie zum Beispiel Fertigungs-, Justage- oder Abstimmfehler auftreten können, welche die Strahlqualität im Vergleich zur Simulation (welche zunächst von Idealbedingungen ausgeht) erheblich verschlechtern können, bis hin zu erhöhten Strahlverlusten.

Deshalb gehört es mittlerweile zur „Standardausstattung“ moderner Teilchendynamik-Simulationsprogramme, entsprechende Werkzeuge zum Aufprägen von Maschinenfehlern sowie zur Fehleranalyse bereitzustellen. Alle Designstudien neueren Datums oder aktuell in Betrieb genommene Linearbeschleuniger von Großprojekten hatten als Auflage die Erstellung detaillierter Fehlertoleranz-Analysen. Die nachfolgende Auflistung von Literaturstellen soll, ohne Anspruch auf Vollständigkeit, einen Eindruck von den Aktivitäten in der Beschleunigergemeinschaft auf diesem Gebiet vermitteln:

- Für den geplanten 160 MeV  $H^-$  - Linearbeschleuniger („Linac4“ [57]) am CERN wurden Fehlertoleranzstudien veröffentlicht [ 74 , 75 ], welche mit dem Simulationsprogramm TraceWin [66] durchgeführt wurden.
- Für die seit 2006 in der Anlaufphase befindliche 1 GeV  $H^-$ , 1.4 MW – Spallations-Neutronenquelle SNS am Oak Ridge National Laboratory [ 76 ] kann die Fehlertoleranzstudie aus der Referenz [77] exemplarisch genannt werden. Diese wurde mit dem Programm PARTREX, einem Begleitmodul zum Teilchensimulationsprogramm PARMILA [65], durchgeführt.
- Für den Anfang 2007 in Betrieb gegangenen ersten Abschnitt des 600 MeV  $H^-$  - Linearbeschleunigers für den „Japan Proton Accelerator Research Complex“ J-PARC [78] kann die Fehlertoleranzstudie aus der Referenz [79] genannt werden, welche ebenfalls mit dem PARMILA-Programm durchgeführt wurde.
- Schließlich sollte zur Vervollständigung dieser Liste das „LANA“-Simulationsprogramm [ 80 ] erwähnt werden. Dieses verfügt ebenfalls über

umfangreiche Definitionsmöglichkeiten von Maschinenfehlern und wurde beispielsweise für die Erstellung von Fehlertoleranzstudien zum „Japan Hadron Facility“ (JHF) Projekt [81] am Japanischen Forschungszentrum KEK in Tsukuba, sowie zum „Rare Isotope Accelerator“ (RIA) [82] eingesetzt.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde das Teilchensimulationsprogramm LORASR (Kapitel 3.2) mit entsprechenden Simulationswerkzeugen zum Aufprägen von Maschinenfehlern, sowie mit Routinen zur Analyse der Auswirkungen der Fehler auf die Strahldynamik ausgestattet. Diese werden in den nachfolgenden Kapiteln 6.2 und 6.3 detailliert beschrieben.

Die Motivation hierzu war, wie bei den vorgenannten Beispielen, durch die Erfordernisse der aktuellen Linearbeschleunigerprojekte am Institut für Angewandte Physik gegeben: Es wurden mehrfach Fehlertoleranzanalysen begleitend zum jeweiligen strahldynamischen Design unter Idealbedingungen gefordert. Diese konnten, nach erfolgter Erweiterung des LORASR-Programms im Rahmen der vorliegenden Arbeit, bereits mehrfach durchgeführt werden. Repräsentative Beispiele hierzu werden in Kapitel 7 vorgestellt, und zwar:

- Überprüfung der Strahldynamik im 217 MHz, 20 MV, 0.3 – 7 MeV/u IH-Linearbeschleuniger für die Heidelberger Ionenstrahl-Therapie (HIT) anhand gemessener Quadrupol-Justagefehler und gemessener Spaltspannungsverteilungen (Kapitel 7.2).
- Aktueller Designentwurf mit Fehlertoleranzanalyse für den 125 mA  $D^+$ , 5-40 MeV normal- und supraleitenden CH-DTL-Abschnitt für IFMIF (Kapitel 7.3).
- Aktueller Designentwurf mit Fehlertoleranzanalyse für den 45 mA, 3-70 MeV Protoneninjektor für GSI-FAIR (Kapitel 7.4).

## Klassifizierung von Maschinenfehlern

Maschinenfehler lassen sich anhand ihres Auftretens in zwei Klassen unterteilen.

- **Statische Fehler:** Diese treten während der Design- und Testphase auf. Sie können festgestellt (d.h. gemessen) und auch behoben werden. Typische Beispiele sind Fehljustagen von Quadrupollinsen oder Driftröhren, Fabrikationsfehler (z. B. Abweichungen der geometrischen Längen), Abweichungen in der Spaltspannungsverteilung oder Gradientenfehler magnetischer Linsen.
- **Dynamische Fehler:** Diese treten im laufenden Betrieb auf. Sie sind zeitabhängig und nur sehr schwer, z. B. mittels Feedback-Einrichtungen, zu beheben. Typische Beispiele sind Schwankungen in der HF-Versorgung (sowohl in der Amplitude als auch in der Phase), mechanische Vibrationen oder auch Schwankungen aufgrund der Strahllast.

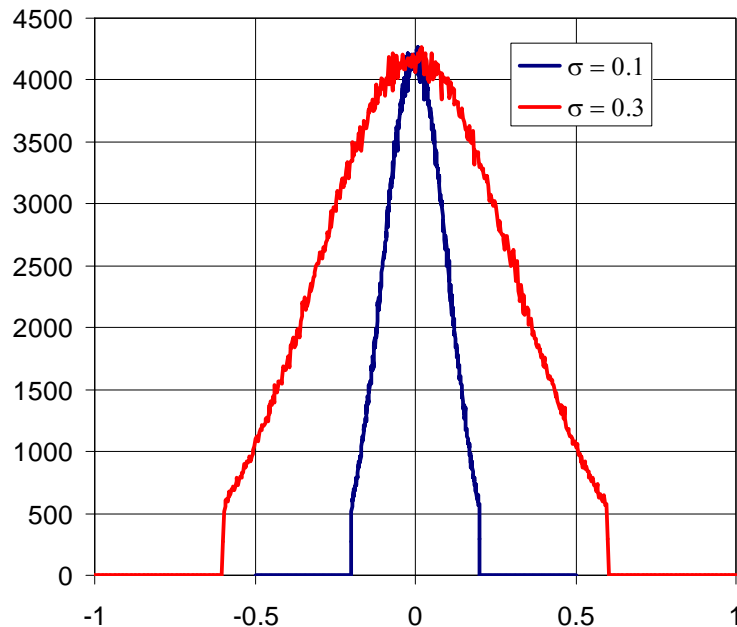
In einem Teilchensimulationsprogramm können Maschinenfehler definiert werden, indem man der betreffenden Komponente eine Abweichung vom Sollwert zuweist. So kann zum Beispiel der transversale Versatz ( $\Delta x, \Delta y$ ) der Achse einer Quadrupollinse relativ zur Strahlachse dadurch simuliert werden, dass die Koordinaten aller Teilchen des Strahls beim Eintritt in die Linse um den Wert  $(-\Delta x, -\Delta y)$  verändert werden, um sie dann beim Austritt aus der Linse um den Betrag  $(\Delta x, \Delta y)$  zurück zu versetzen.

Alle in LORASR im Rahmen der vorliegenden Arbeit implementierten Maschinenfehler können sowohl „manuell“ (also durch explizite Angabe des Fehlerwertes für jede betroffene Komponente) als auch statistisch verteilt definiert werden.

Eine manuelle Fehlerangabe ist dann zweckmäßig, wenn Messdaten vorliegen, so zum Beispiel Messprotokolle über die Justage der magnetischen Linsen oder mit der

Störkörpermethode gemessene Spaltspannungen. In diesem Fall reicht ein einziger Simulationslauf aus, um die Auswirkungen einer bestimmten Kombination von (gemessenen) Fehlern auf die Strahldynamik zu untersuchen.

Bei statistisch generierten Fehlern wird dagegen ein Fehlerintervall vorgegeben und der Setzwert für jede Komponente per Zufallsgenerator ermittelt. Im Falle von LORASR erzeugt der Zufallsgenerator eine Gaußverteilung der Fehler, welche bei der  $2\sigma$ -Breite abgeschnitten wird, wie in Abbildung 54 beispielhaft dargestellt.



**Abbildung 54** Beispiel einer Gaußverteilung der Fehleramplituden, abgeschnitten beim Maximum  $A = \pm 2\sigma$ . Die X-Achse stellt die Größe des Fehlers dar, so zum Beispiel einen Versatz  $\Delta x \in [-0.6 \text{ mm}, +0.6 \text{ mm}]$  von der Strahlachse. Auf der Y-Achse wurde die Anzahl der Elemente in jedem Teilintervall  $\Delta(\Delta x)$  aufgetragen.

Um die Gaußverteilung sichtbar zu machen, wurden  $10^6$  Elemente auf  $10^3$  Teilintervalle  $\Delta(\Delta x)$  verteilt, mit  $\Delta(\Delta x) = 1/100 \sigma$ .

Bei statistisch erzeugten Fehler-Setzwerten stellt jeder Simulationslauf eine beliebige Kombination von Einzelfehlern dar, wobei sich die Überlagerung der Effekte ganz unterschiedlich auf die Strahldynamik auswirken kann. Daher sollten möglichst viele Kombinationen simuliert werden. Für eine statistisch aussagekräftige Ergebnisinterpretation sind typischerweise 100 bis 1000 Simulationsläufe mit je  $10^5$  bis  $10^6$  Makroteilchen notwendig.

## 6.2. Implementierung von Routinen zur Simulation von Maschinenfehlern in LORASR

Eine Übersicht aller im Rahmen der vorliegenden Arbeit neu hinzugekommenen Elemente des Simulationsprogramms LORASR findet man bereits im entsprechenden Kapitel 3.2, und zwar als Tabelle 3-2 zusammengefasst.

Im Folgenden werden daraus die LORASR-Routinen zur Simulation von Maschinenfehlern näher vorgestellt. Diese werden zunächst in der Tabelle 6-1 zusammengefasst.

**Tabelle 6-1 In LORASR definierbare Arten von Maschinenfehlern.**

Fehlerart	Typische Fehlertoleranzgröße
Verschiebungen (Translationen) $\Delta X_i, \Delta Y_i$ der fokussierenden Elemente (Quadrupole oder Solenoide; separate Werte für jede Einzellinse mit Index $i$ )	$\leq 0.1 \text{ mm}$
Rotationen $\Delta\phi_{x,i}, \Delta\phi_{y,i}, \Delta\phi_{z,i}$ der fokussierenden Elemente (Quadrupole oder Solenoide; separate Werte für jede Einzellinse mit Index $i$ oder gemeinsame Drehung aller Linsen eines Multipletts)	$\Delta\phi_x \leq 5 \text{ mrad}$ $\Delta\phi_y \leq 5 \text{ mrad}$ $\Delta\phi_z \leq 20 \text{ mrad}$
Schwankungen der Spaltspannungsamplituden $\Delta U_{ij}$ (separate Werte für jeden einzelnen Beschleunigungsspalt) Dabei bezeichnet Index $i$ die Kavität und Index $j$ den Beschleunigungsspalt.	$\Delta U_{ij} / U_{ij} \leq 5 \%$
Schwankungen der Spaltspannungsamplituden $(1+\Delta_i) \cdot U_{ij}$ für ganze Beschleunigerkavitäten mit Index $i$ Dabei wird allen Gaps der Kavität $i$ der gleiche Faktor $\Delta_i$ zugewiesen.	$(\Delta_i \cdot U_{ij}) / U_{ij} \leq 1 \%$
Schwankungen der HF-Phase $\Delta\phi_i$ für ganze Beschleunigerkavitäten mit Index $i$ Dabei wird am Eingang (erster Spalt) der Kavität $i$ folgender Phasenfehler aufgeprägt: $\phi_k = \phi_k + \Delta\phi_i$ . Der Index $k$ bezeichnet die Makroteilchen des Strahls.	$\Delta\phi_i \leq 1^\circ$

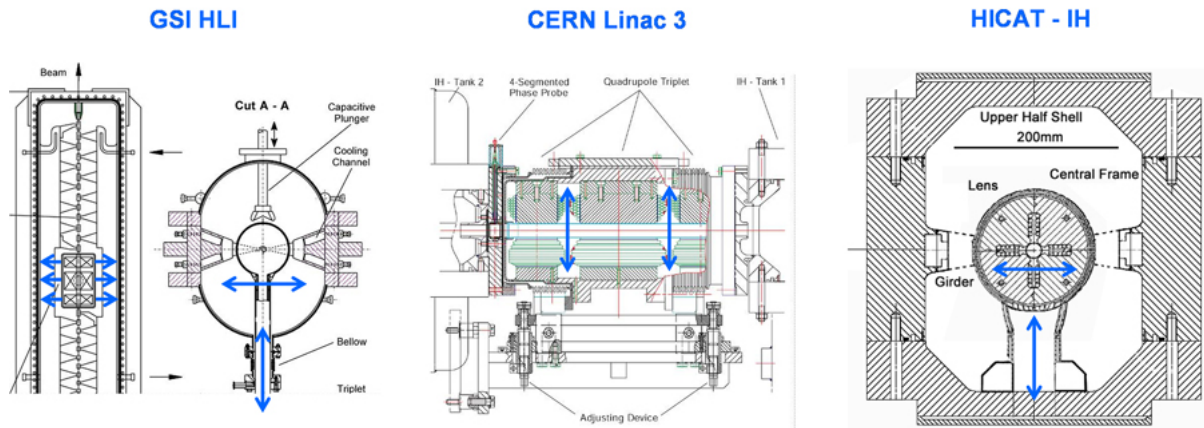
Weitere Fehlerarten wie zum Beispiel Quadrupol-Gradientenfehler, Verschiebungen der Beschleunigerkavitäten oder einzelner Spalte, geometrische Längenabweichungen, Fehljustage der Driftröhren usw. sind zurzeit nicht in LORASR implementiert, können aber bei Bedarf in Zukunft ergänzt werden.

Es muss dabei aber berücksichtigt werden, dass sich nicht alle Fehlerarten gleichermaßen auf die Strahldynamik auswirken. Die in der Tabelle 6-1 aufgelisteten Größen gehören bereits zu den wichtigsten und in der Beschleunigergemeinschaft im Rahmen von Fehlertoleranz-Analysen am häufigsten eingesetzten Fehlerarten [74,75,77,79,81,82].

### 6.2.1. Translationen $\Delta X_i$ , $\Delta Y_i$ der fokussierenden Elemente

In Abbildung 55 werden mögliche Ursachen für das Entstehen transversaler Versätze ( $\Delta X_i$ ,  $\Delta Y_i$ ) der Achse einer Quadrupollinse relativ zur Strahlachse gezeigt:

Zum einen können Fabrikationsfehler (Nichteinhaltung mechanischer Toleranzen) dazu führen, dass einzelne Singulett in einem gemeinsamen Linsengehäuse relativ zueinander versetzt sind. Zum anderen kann das gesamte Gehäuse, zum Beispiel durch Deformationen bei der Herstellung, während der Montage oder im Betrieb (Erwärmung) eine Achsenablage erfahren. Schließlich können Justagefehler als weitere Ursache genannt werden.



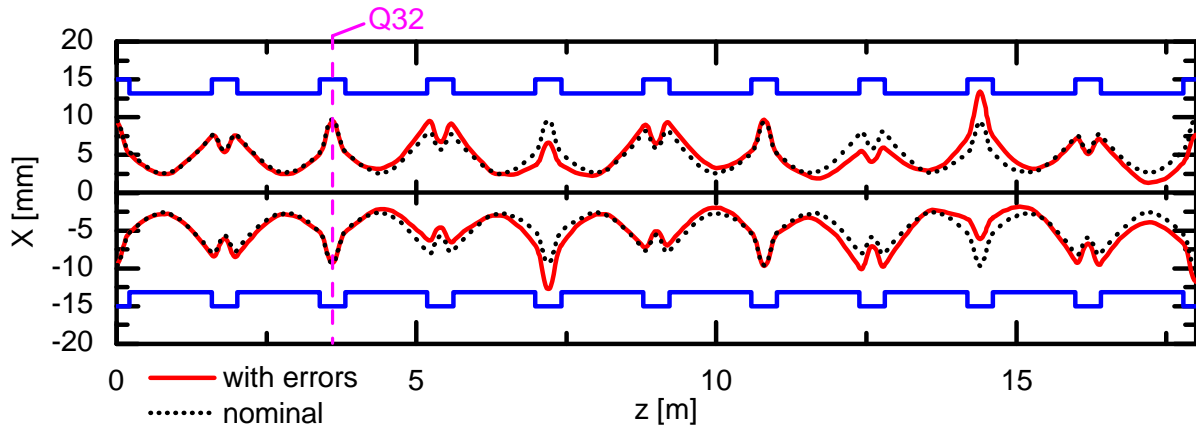
**Abbildung 55** Beispiel möglicher Verschiebungen von Quadrupollinsen.

Eine Beispielrechnung für statistisch verteilte Translationen der Singulettachsen in einem ansonsten angepassten Quadrupol-Triplett-Kanal mit  $\Delta X_{\max} = \Delta Y_{\max} = 2\sigma = 0.05 \text{ mm}$  wird in Abbildung 56 gezeigt. Die ersten dazugehörigen Setzwerte für ( $\Delta X_i$ ,  $\Delta Y_i$ ) werden in Tabelle 6-2 aufgelistet.

Der Wert  $\Delta X_{32} = 0.049 \text{ mm}$  für das Singulett „Q32“ (zweite Linse des dritten Multipletts) fällt dadurch auf, dass er nahe am Maximum  $\Delta X_{\max} = 0.05 \text{ mm}$  liegt. Folglich ist an genau dieser Stelle der Beginn einer Enveloppenoszillation in der X-Z-Ebene in Abbildung 56 sichtbar. Um diese besser erkennbar zu machen, wurde der ungestörte Fall als gepunktete schwarze Kurve dargestellt. Die Enveloppenoszillation verstärkt sich entlang des Strahlganges, was als Überlagerung des Effektes vom Ursprung der Störung in der Linse Q32 mit denen der nachfolgenden Linsen zu verstehen ist. Es ist leicht vorstellbar, dass es Fälle gibt, bei welchen sich die Effekte konstruktiv überlagern wie auch Fälle mit teilweiser Kompensation der Enveloppenoszillation. Daher sind für statistische Untersuchungen viele Läufe mit unterschiedlichen Startwerten der Fehlerverteilung unumgänglich.

**Tabelle 6-2** Beispiel statistisch verteilter Translationen ( $\Delta X_i$ ,  $\Delta Y_i$ ) für  $2\sigma = 0.05 \text{ mm}$ .

SINGLE LENS DISPLACEMENTS :				
SECT. NO.	LENS. NO.	DELTA X [mm]	DELTA Y [mm]	
1	1	0.002	-0.042	
1	2	0.044	-0.033	
2	1	-0.032	0.033	
2	2	0.002	0.017	
2	3	-0.026	-0.016	
3	1	0.019	0.022	
<b>Q32</b> 3	2	0.049	-0.006	
3	3	-0.005	-0.001	



**Abbildung 56** Beispielrechnung zur Veranschaulichung der Auswirkung von statistisch verteilten transversalen Versätzen  $(\Delta X_i, \Delta Y_i)$  der Linsenachsen auf die Strahldynamik in einem angepassten Quadrupol-Triplett-Kanal.

**Anmerkung:**

Alle im Kapitel 6.2 gezeigten Beispiele zur Definition von Maschinenfehlern und die darauf basierenden Strahldynamiksimulationen wurden mit einem „Testbeschleuniger“ durchgeführt, mit folgenden Eigenschaften und Parametern:

- Angepasster Strahl, keine Raumladungseffekte, keine Beschleunigung.
- Hauptstrahlparameter:  $A/q = 10$ ,  $W = 4$  MeV/u.
- HF Kavitäten: 10  $\beta\lambda/2$  Resonatoren mit je 20 Gaps bei  $\varphi_s = -90^\circ$  und  $V_{gap,eff} = 213$  kV; Resonanzfrequenz  $f = 202$  MHz.
- Magnetische Quadrupole: 2 Dupletts am Anfang und Ende, sowie 9 Triplets zwischen den HF-Kavitäten. Linsenparameter:  $B' = 11.9$  T/m, Polschuhlängen 102, 180 und 102 mm je Triplett.

Ein so definierter Testbeschleuniger hat den Vorteil, dass Störungen durch Maschinenfehler leicht sichtbar werden, wobei man die Einflüsse auf die transversalen Ebenen (hauptsächlich durch Fehler der Fokussierelemente) von den Einflüssen auf die longitudinale Ebene (hauptsächlich durch Spaltspannungs- und HF-Fehler) voneinander getrennt betrachten kann.

### 6.2.2. Rotationen $\Delta\phi_{x,i}$ , $\Delta\phi_{y,i}$ , $\Delta\phi_{z,i}$ der fokussierenden Elemente

Zur Definition der durch Justage- oder mechanische Fehler bedingten Rotationen  $\Delta\varphi_x$ ,  $\Delta\varphi_y$  und  $\Delta\varphi_z$  von fokussierenden Elementen wie Quadrupolen oder Solenoiden werden in LORASR Roll-Nick-Gier-Winkel (englisch: Roll-Pitch-Yaw) gemäß Abbildung 57 verwendet. Diese beschreiben Drehungen um drei rechtwinklig zueinander stehende Koordinatenachsen und sind unter diesen Bezeichnungen aus der Flugsteuerung bekannt.

Für die Implementierung in LORASR gelten folgende Konventionen und Restriktionen:

- Die Drehachse verläuft durch die geometrische Mitte des jeweiligen Elements. Wenn dies in Wirklichkeit nicht der Fall sein sollte, muss der Versatz als Kombination von Rotationen  $(\Delta\varphi_x, \Delta\varphi_y, \Delta\varphi_z)$  und Translationen  $(\Delta X, \Delta Y)$  definiert werden.

Handelt es sich um ein Duplett oder Triplett, verläuft die Drehachse durch die

geometrische Mitte der gesamten Anordnung, Driftstrecken mit eingeschlossen (= Mitte des Linsengehäuses).

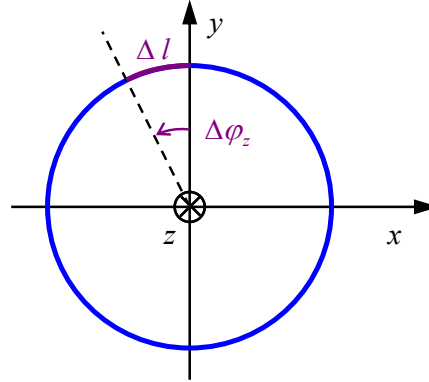
- Als Drehachsen werden die Achsen eines linkshändigen kartesischen Koordinatensystems verwendet (vergl. Abbildung 57; linkshändige Koordinatensysteme entsprechen der Konvention für Linearbeschleuniger). Die Drehwinkel werden jeweils entgegen dem Uhrzeigersinn gezählt.

#### Roll (German: Rollen)

$$\Delta l \approx 0.1 \text{ mm}$$

$$\text{at } R = 100 \text{ mm (lens housing)}$$

$$\Rightarrow \Delta \varphi_z = 1 \text{ mrad}$$

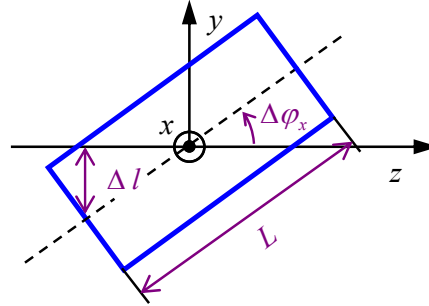


#### Pitch (German: Nicken)

$$\Delta l \approx 0.1 \text{ mm}$$

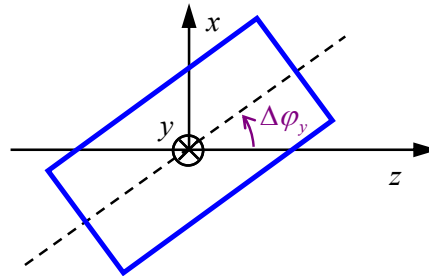
$$L/2 = 150 \text{ mm}$$

$$\Rightarrow \Delta \varphi_x = 0.67 \text{ mrad}$$



#### Yaw (German: Gieren)

$$\Delta \varphi_y = 0.67 \text{ mrad} \quad (\text{see pitch})$$



**Abbildung 57 Definition der Roll-Pitch-Yaw-Winkel in LORASR mit Zahlenbeispielen.**

Die Drehwinkel werden in Milliradian angegeben, wobei für die Errechnung der Beispielwerte aus Abbildung 57 von einem gemessenen Versatz  $\Delta l = 0.1 \text{ mm}$  am Gehäuse einer typischen Quadrupol-Triplettlinse in allen Drehrichtungen ausgegangen wurde. Die Toleranzgrenzen für Teilchensimulationsrechnungen sind mit  $\Delta \varphi_x = \Delta \varphi_y \leq 5 \text{ mrad}$  und  $\Delta \varphi_z \leq 20 \text{ mrad}$  wesentlich größer.

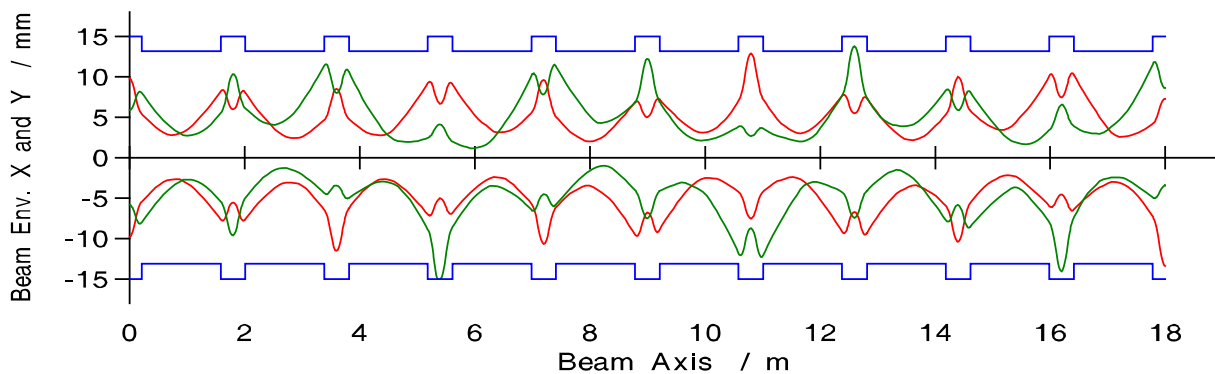
Eine Beispielrechnung für statistisch verteilte Rotationen um die transversalen Achsen mit  $\Delta \varphi_{x,\max} = \Delta \varphi_{y,\max} = 2 \text{ mrad}$  und  $\Delta \varphi_z = 0 \text{ mrad}$  wird in Abbildung 58 gezeigt. Tabelle 6-3 zeigt einen Ausschnitt der dazugehörigen Setzwerte für  $(\Delta \varphi_{x,i}, \Delta \varphi_{y,i}, \Delta \varphi_{z,i})$ . Durch die Definition der Parameter „erste Linse“ und „letzte Linse“ (vergl. Tabelle 6-3) zu jedem



Datensatz  $(\Delta\varphi_{x,i}, \Delta\varphi_{y,i}, \Delta\varphi_{z,i})$  können die Singulets zu Multipletts zusammengefasst und, wie bereits erwähnt, um gemeinsame Drehachsen rotiert werden.

**Tabelle 6-3 Beispiel statistisch verteilter Rotationen  $(\Delta\varphi_{x,i}, \Delta\varphi_{y,i}, \Delta\varphi_{z,i})$  mit  $2\sigma_x = 2\sigma_y = 2$  mrad und  $2\sigma_z = 0$  mrad.**

SECT. NO.	FIRST LENS	LAST LENS	dPh_X [mrad]	dPh_Y [mrad]	dPh_Z [mrad]
1	1	2	0.060	-0.516	0.000
2	1	2	1.749	0.447	0.000
2	3	3	-1.289	0.862	0.000
3	1	3	0.067	0.119	0.000
4	1	3	-1.023	-1.055	0.000
5	1	3	0.772	-1.102	0.000



**Abbildung 58 Beispielrechnung zur Veranschaulichung der Auswirkung von statistisch verteilten transversalen Rotationen  $(\Delta\varphi_{x,i}, \Delta\varphi_{y,i})$  der Linsenachsen auf die Strahldynamik in einem angepassten Quadrupol-Triplett-Kanal. Dabei werden die X-Z-Enveloppen in rot und die Y-Z-Enveloppen in grün dargestellt.**

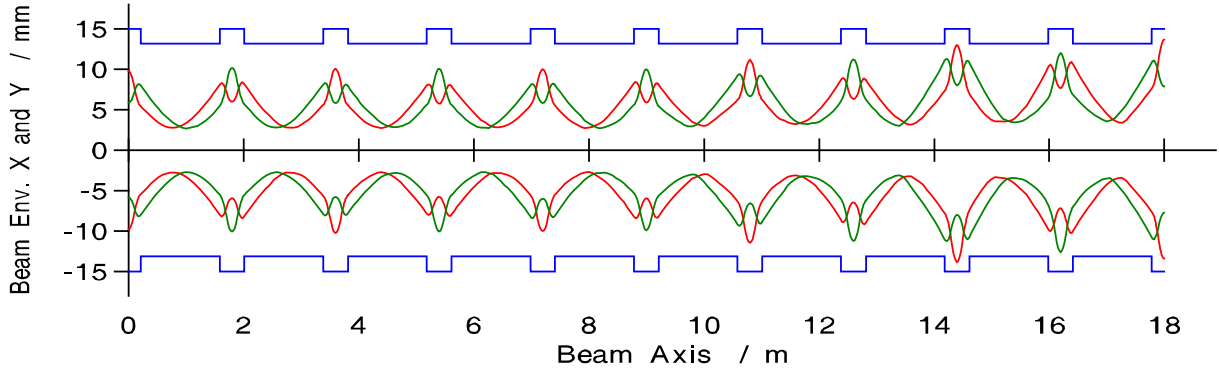
Das Ergebnis aus Abbildung 58 lässt sich qualitativ mit jenem aus Abbildung 56 vergleichen: In beiden Fällen werden Oszillationen der Strahlenumhüllungen und somit auch des Schwerpunktteilchens in der jeweiligen Ebene hervorgerufen. Dieses Ergebnis lässt sich anschaulich erklären, indem man sich die Rotationen bei kleinen Winkeln als zusammengesetzte Translationen hinreichend kurzer Linsensegmente vorstellt.

Ein völlig anderes Bild ergibt sich dagegen in Abbildung 59, wenn ausschliesslich Rotationen  $\Delta\varphi_{z,i}$  um die longitudinale Achse untersucht werden: Der Strahl wird insgesamt „aufgeweitet“ und weist dafür keine Oszillationen auf. Der Effekt wird erst bei vergleichbar größeren maximalen Drehwinkeln deutlich sichtbar. Im Falle von Solenoidlinsen ist diese Fehlerart wegen der Rotationssymmetrie des Magnetfeldes ohne Bedeutung.

**Tabelle 6-4 Beispiel statistisch verteilter Rotationen  $\Delta\varphi_{z,i}$  für  $2\sigma_x = 2\sigma_y = 0$  mrad und  $2\sigma_z = 20$  mrad.**

SECT. NO.	FIRST LENS	LAST LENS	dPh_X [mrad]	dPh_Y [mrad]	dPh_Z [mrad]
1	1	2	0.000	0.000	-2.172
2	1	2	0.000	0.000	12.377
2	3	3	0.000	0.000	-9.723

SECT. NO.	FIRST LENS	LAST LENS	dPh_X	dPh_Y	dPh_Z
3	1	3	0.000	0.000	5.203
4	1	3	0.000	0.000	6.372
5	1	3	0.000	0.000	2.716

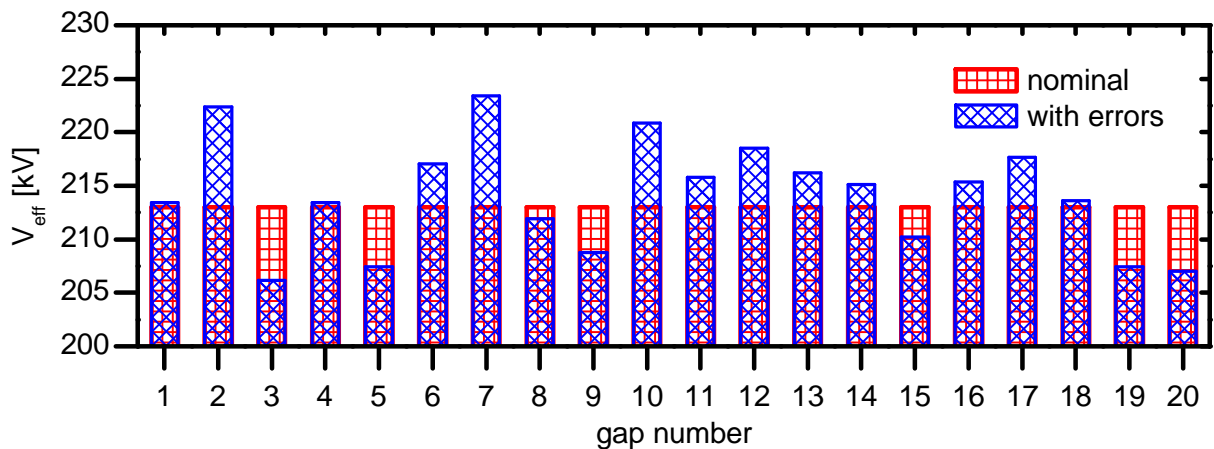


**Abbildung 59** Beispielrechnung zur Veranschaulichung der Auswirkung von statistisch verteilten longitudinalen Rotationen  $\Delta\varphi_{z,i}$  der Linsenachsen auf die Strahldynamik in einem angepassten Quadrupol-Triplett-Kanal. Dabei werden die X-Z-Enveloppen in rot und die Y-Z-Enveloppen in grün dargestellt.

### 6.2.3. Schwankungen der Spaltspannungsamplituden $\Delta U_{ij}$

In LORASR können Abweichungen  $\Delta U_{i,j}$  von den Sollspannungen (wobei  $i$  = Resonator-Index und  $j$  = Spaltindex) sowohl für einzelne Spalte als auch gemeinsam für alle zu einer Kavität gehörenden Spalte definiert werden.

Einzelspaltfehler sind zum Beispiel Abweichungen der gemessenen Spaltspannungen von den vorausgesetzten Werten und entstehen durch Grenzen bei der HF-Abstimmbarkeit der Resonatoren. Einzelspalt-Abweichungen  $\Delta U_{i,j}/U_{i,j} \leq 5\%$  gelten als akzeptable Abstimmgenauigkeiten für mehrspaltige Strukturen. Das in Abbildung 60 gezeigte Beispiel für Einzelspaltabweichungen wurde statistisch generiert und als Eingabesatz für die Simulationsergebnisse aus Abbildung 61 verwendet.



**Abbildung 60** Beispiel für die Abweichung von Sollspannungen einzelner Gaps, z.B. durch begrenzte Abstimmgenauigkeit von HF-Kavitäten. Die Fehler wurden statistisch erzeugt, und zwar gaußverteilt mit  $\Delta V_{\text{max}}/V_{i,j} = 5\%$ .

Zusätzlich kann die Spannungsamplitude im gesamten HF-Resonator schwanken, so zum Beispiel wegen einer instabilen HF-Versorgung im laufenden Betrieb. Hierfür liegt der Fehler typischerweise im Bereich  $(\Delta_i \cdot U_{i,j})/U_{i,j} \leq 1\%$ .

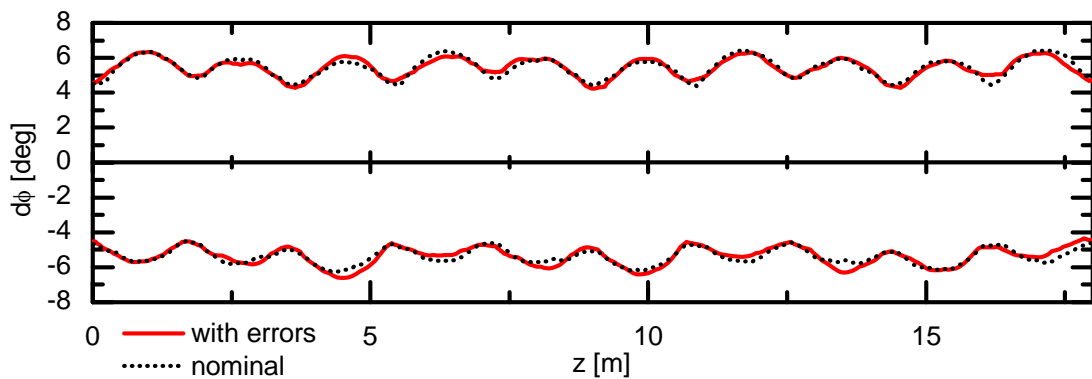
In Tabelle 6-5 wird ein Beispieldatensatz statistisch generierter relativer Spannungsabweichungen in Auszügen gezeigt (nur die ersten drei Gaps von drei verschiedenen Kavitäten).

Trotz der relativ großen Fehler sieht man beim Simulationsergebnis aus Abbildung 61 nur minimale Abweichungen der  $d\varphi(z)$ -Strahlenveloppen im Vergleich zum ungestörten Fall. Dieses Ergebnis lässt sich dadurch erklären, dass der für die Validierung der Fehler Routinen verwendete „Testbeschleuniger“ keine Teilchenbeschleunigung (sondern nur longitudinale Fokussierung) bewirkt, da sich alle Gaps bei der Sollphase  $\varphi_s = -90^\circ$  befinden. Somit bewirken Abweichungen  $\Delta U_{i,j}$  der Spannungsamplituden keine Schwankungen der Strahlenergie, sondern nur Schwankungen der longitudinalen Fokussierstärken. In einem „echten“ Beschleuniger mit Teilchenenergiezuwachs hätten Fehler dieser Größenordnung weit dramatischere Konsequenzen auf die longitudinale Strahldynamik.

**Tabelle 6-5 Beispiel statistisch verteilter Abweichungen  $\Delta U_{i,j}$  von den Sollspannungen. Die Zahlenwerte für den Gesamtfehler aus der rechten Spalte ergeben sich aus der Addition der Beiträge für die Tank-Abweichungen  $(\Delta_{i,\max} \cdot U_{i,j})/U_{i,j} = 5\%$  sowie für die Einzelspalt-Abweichungen  $\Delta U_{i,j,\max}/U_{i,j} = 5\%$ .**

TANK AND SINGLE GAP VOLTAGE ERRORS :

TANK NO.	GAP NO.	NOMINAL VOLT. [MV]	TANK VOLT. FACT. [ ]	TOT. FACT. [ ]
1	1	0.213	1.002	1.003
1	2	0.213	1.002	1.045
1	3	0.213	1.002	0.969
-----				
2	21	0.213	1.044	1.094
2	22	0.213	1.044	1.054
2	23	0.213	1.044	1.047
-----				
10	181	0.213	1.037	1.031
10	182	0.213	1.037	1.056
10	183	0.213	1.037	1.059



**Abbildung 61 Beispielrechnung zur Veranschaulichung der Auswirkung von statistisch verteilten Schwankungen der Spaltspannungsamplituden  $\Delta U_{i,j}/U_{i,j}$  auf die longitudinale Strahldynamik in einem angepassten Fokussier-Kanal mit  $\varphi_s = -90^\circ$ .**

#### 6.2.4. Schwankungen der HF-Phase $\Delta\phi_i$

Schwankungen der Eingangsphase  $\Delta\phi_i$  ganzer Beschleunigerkavitäten werden beispielsweise durch entsprechende Instabilitäten in der HF-Versorgung verursacht.

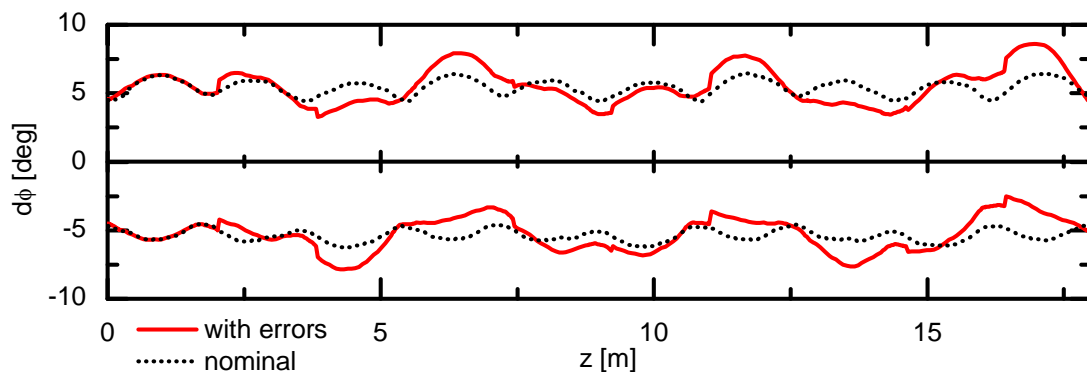
In LORASR wird diese Fehlerart simuliert, indem man einen Phasen-Offset  $\Delta\phi_i$  am Eingang der Kavität  $i$  aufbringt, d.h. die Phasenkoordinaten aller Simulationsteilchen mit Index  $k$  vor Erreichen des ersten Spalts um  $\phi_k = \phi_k + \Delta\phi_i$  „verschiebt“. Hierfür muss der Anwender in der Eingabedatei definieren, welche Gaps jeweils zu einer gemeinsamen Kavität gehören. Die Tankphasenfehler  $\Delta\phi_i$  werden statistisch (gaußverteilt) generiert.

##### Anmerkung:

Die Definition von HF-Phasenfehlern  $\Delta\phi_{i,j}$  (mit  $i$  = Resonator-Index und  $j$  = Spaltindex) für jeden einzelnen Spalt, also analog zur Fehlerdefinition der Spannungsamplituden, ist für LORASR nicht vorgesehen und wäre nach Ansicht des Autors wenig sinnvoll: Diese Fehlerart käme durch geometrische Längenabweichungen zustande, d.h. aufgrund falscher Gap- und Driftröhrenlängen wären die Spaltmitten geometrisch versetzt und die Strahlteilchen würden diese entsprechend zu einer um  $\Delta\phi_{i,j}$  versetzten HF-Phase erreichen. Es ist jedoch davon auszugehen, dass die bei der Herstellung und Justage der Komponenten erreichbare Präzision in Bezug auf Gap- und Driftröhrenlängen in der Regel unterhalb der aus Strahldynamikrechnungen resultierenden  $\Delta\phi_{i,j}$ -Fehlertoleranzgrenzen liegen sollte.

**Tabelle 6-6 Beispiel statistisch verteilter Abweichungen der Tankphasen  $\Delta\phi_i$ , mit  $\Delta\phi_{i,\max} = \pm 1^\circ$ .**

TANK PHASE OFFSET ERRORS :	
TANK NO.	PHASE ERROR [ ° ]
1	0.030
2	0.875
3	-0.645
4	0.034
5	-0.511
6	0.386
7	0.971
8	-0.093
9	-0.396
10	0.745



**Abbildung 62 Beispielrechnung zur Veranschaulichung der Auswirkung von statistisch verteilten Schwankungen der Tankphasen  $\Delta\phi_i$ .**

In Tabelle 6-6 wird ein Beispieldatensatz statistisch generierter Tankphasenfehler gezeigt. Das entsprechende Simulationsergebnis wird in Abbildung 62 dargestellt.

Der Vergleich mit dem Simulationsergebnis aus Abbildung 61 zeigt, dass diese Fehlerart die Strahldynamik des verwendeten „Testbeschleunigers“ viel stärker beeinträchtigt: Durch die Abweichung von  $\varphi_s = -90^\circ$  beim Durchlaufen der Gaps wirken diese entweder leicht beschleunigend oder abbremsend. Dies hat die beobachtete starke Oszillation sowohl der  $d\varphi(z)$ - als auch der  $dW(z)$ -Strahlenveloppen (hier nicht gezeigt) zur Folge.

#### 6.2.5. „Batch“-Modus zur Untersuchung statistisch verteilter Maschinenfehler

Die innerhalb der Kapitel 6.2.1 bis 6.2.4 beschriebenen Fehlerarten können, unabhängig davon ob sie explizit angegeben oder statistisch ermittelt wurden, zunächst nur auf einzelne Simulationsläufe angewendet werden.

Für Fehlertoleranzanalysen basierend auf statistisch generierten Maschinenfehler ist es jedoch erforderlich, zwischen 100 und 1000 Simulationsläufen mit je  $10^5$  bis  $10^6$  Makroteilchen durchzuführen. Für diesen Zweck wurde in LORASR ein „Batch“-Modus implementiert, welcher folgende Eigenschaften besitzt:

- Es können nacheinander bis zu 9999 Simulationsläufe durchgeführt werden, wobei der Anfangswert des Zufallsgenerators jeweils um 1 erhöht wird, so dass für jeden Lauf eine eigene Kombination von Fehlern der einzelnen Elemente definiert wird.
- Zusätzlich zu den standardmäßigen LORASR-Ausgabedaten wird eine Reihe von Datensätzen erzeugt, welche die Ergebnisse der Fehlerstudien protokollieren. Einige davon sind in Tabelle 6-7 aufgelistet. Sie dienen als Datenquellen für die Fehleranalysefunktionen, welche im Kapitel 6.3 vorgestellt werden.
- Die im Batchmodus generierten zusätzlichen Dateien haben eindeutig festgelegte Namen, aus welchen man den Dateinhalt sowie die Nummer des Simulationslaufs erschließen kann, so zum Beispiel 'tren0078' für die transversalen Enveloppen des Simulationslaufs Nummer 78. Dadurch wird die einfachste Form von verteiltem Rechnen realisiert: Läufe mit verschiedenen Fehler-Setzwerten können auf mehreren Rechnern ausgeführt (so zum Beispiel die Läufe '0001' bis '0100' auf Rechner 1, '0101' bis '0200' auf Rechner 2 usw.) und die Ergebnisse anschließend gemeinsam ausgewertet werden.

**Tabelle 6-7 Beschreibung der von LORASR für Fehleranalyse erzeugten Dateien (Liste unvollständig). Die Bezeichnung '1234' dient als Platzhalter für die jeweilige Laufnummer zwischen '0001' und '9999'.**

Dateiname	Beschreibung	Anwendung
erms1234	Verlauf der RMS-Emittanz entlang der Strahlachse	Berechnung der Wahrscheinlichkeitsverteilung für das zusätzliche Emittanzwachstum (vergl. Kapitel 6.3.3)
qmis1234	Statistisch verteilte Translationen $\Delta X_i$ , $\Delta Y_i$ der Fokussierelemente	Nur zur Überprüfung der Setzwerte (vergl. Tabelle 6-2)
tren1234	Transversale Strahlenveloppen <u>und</u> Verlustprofile	Berechnung von gemittelten Verlustprofilen und Apertur-Füllfaktoren (vergl. Kapitel 6.3.1 und 6.3.2)

### 6.3. Implementierung neuer Werkzeuge zur Fehleranalyse und Ergebnisdarstellung in LORASR

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde das Simulationsprogramm LORASR mit zusätzlichen Diagrammen ausgestattet, welche der Visualisierung und Analyse der Simulationsergebnisse bei eingeschalteten Maschinenfehlern dienen.

Diese werden in Tabelle 6-8 als Diagramm 9 bis 12 zusammen mit den standardmäßig verfügbaren Diagrammen aufgelistet und werden in den nachfolgenden Kapiteln mit den dazugehörigen Analysefunktionen näher erläutert.

Die neuen Diagramme sind naturgemäß nur dann verfügbar, wenn der Benutzer eine entsprechende Anzahl von Programmläufen im Batch-Modus durchgeführt hat (vergl. Kapitel 6.2.5) und die für statistische Auswertungen benötigten Datenstrukturen (vergl. Tabelle 6-7) vorhanden sind.

**Tabelle 6-8 Diagrammoptionen des Teilchensimulationsprogramms LORASR.**

<b>Ursprünglich verfügbare Diagramme</b>	
<b>Nummer</b>	<b>Beschreibung</b>
1	Transversale Strahlenveloppen
2	Longitudinale Strahlenveloppen
3	Phasenraumverteilungen X-X'
4	Phasenraumverteilungen Y-Y'
5	Phasenraumverteilungen $d\Phi$ - $dW$
6	Trajektorien des Strahlschwerpunkts im longitudinalen Phasenraum
7	Relatives RMS-Emittanzwachstum entlang der Z-Achse
8	Phasenvorschub pro Strukturperiode
<b>Neu hinzugekommene Diagramme</b>	
<b>Nummer</b>	<b>Beschreibung</b>
9	Verlustprofile und transversale Strahlenveloppen für einzelne Läufe (Beschreibung in Kapitel 6.3.1)
10	Gemeinsame maximale Strahlenveloppen sowie gemittelte Verlustprofile (Bestimmt durch Überlapp der Ergebnisse aus vielen Läufen; Beschreibung in Kapitel 6.3.1)
11	Wahrscheinlichkeitsverteilung des maximalen Apertur-Füllfaktors (Beschreibung in Kapitel 6.3.2)
12	Wahrscheinlichkeitsverteilung des zusätzlichen RMS-Emittanzwachstums (Beschreibung in Kapitel 6.3.3)

### 6.3.1. Verlustprofile und gemeinsame Strahlenveloppen

#### Verlustprofile und transversale Strahlenveloppen für einzelne Läufe (Diagramm ‘9’)

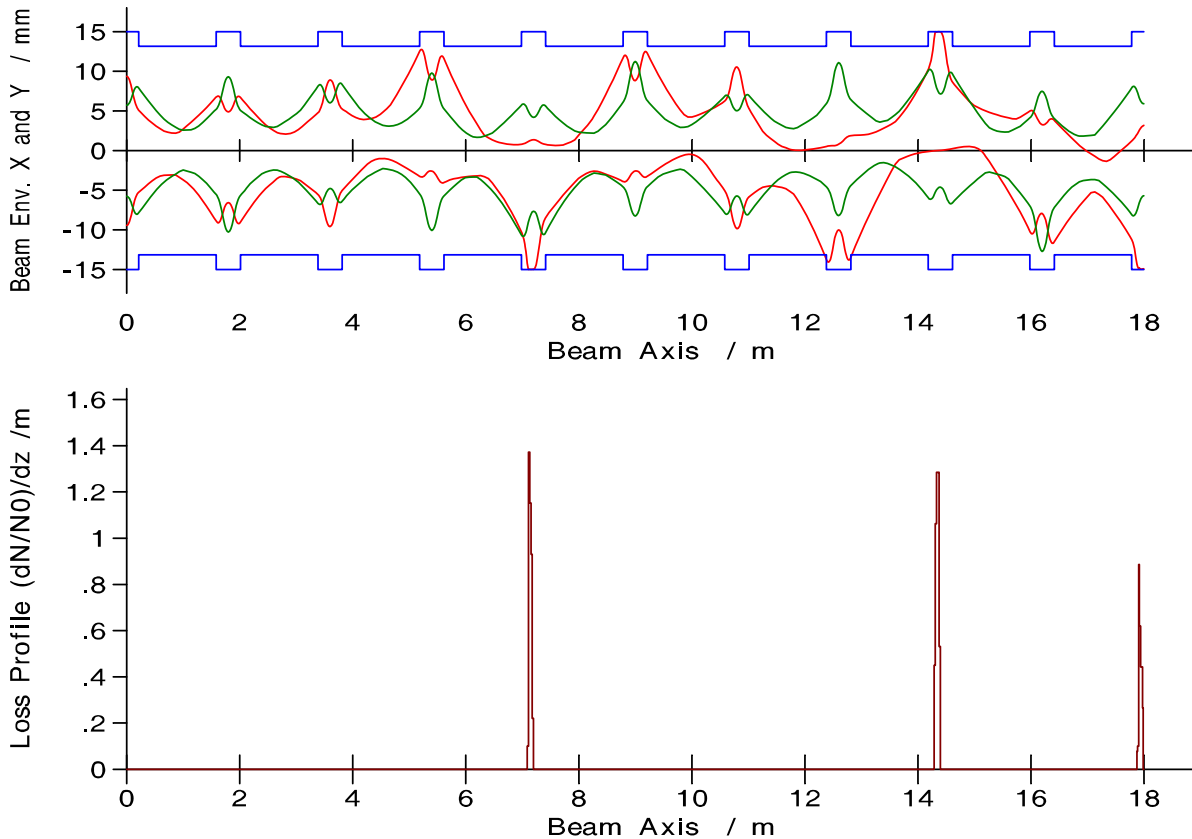
Dieses neue LORASR-Diagramm gibt Auskunft über die Verteilung der Teilchenverluste entlang der Strahlachse. Dabei werden einzelne Simulationsläufe betrachtet und der Graph ist immer (also nicht nur im Batch-Modus) als Ausgabeoption verfügbar, denn auch bei Simulationsläufen ohne Maschinenfehler können Teilchenverluste auftreten.

Die Verlustrate  $(dN/N_0)/dz$  hat die Einheit  $1/m$  und wird nach Gleichung (6.1) bestimmt.

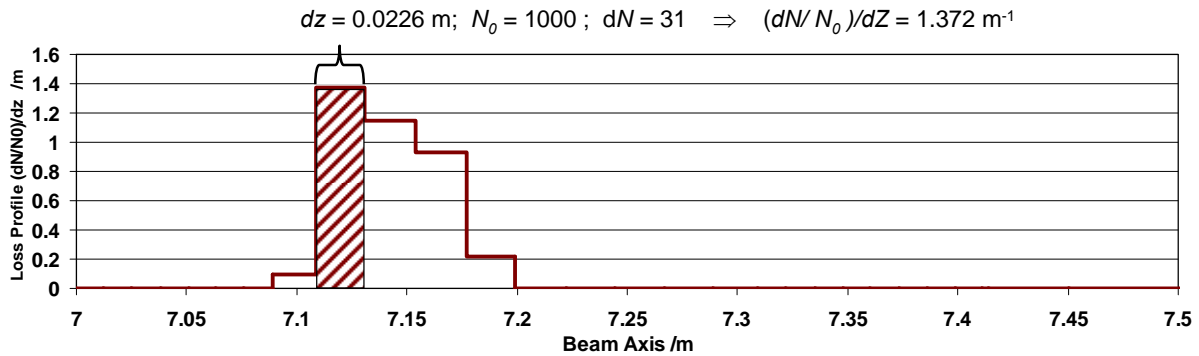
$$\frac{(dN/N_0)}{dz} = \frac{\text{Anzahl lokal verlorener Teilchen} / \text{Gesamtteilchenzahl}}{\text{Länge der Strecke mit Teilchenverlust}} \left[ \frac{1}{m} \right] \quad (6.1)$$

Grafisch aufgetragen, vermittelt diese Größe einen optischen Eindruck über den Ort und das Ausmaß der Teilchenverluste, wie man aus Abbildung 63 leicht erkennen kann.

Dabei ist die Länge des longitudinalen Segments  $dz$ , entlang welchem lokale Teilchenverluste entstehen, von entscheidender Bedeutung: Je kürzer  $dz$ , umso größer ist der Zahlenwert von  $(dN/N_0)/dz$ . Somit wird für den Anwender sofort sichtbar, ob stark örtlich begrenzte Teilchenverluste auftreten, welche auch in der Praxis die größte Gefahr für die Beschleunigerkomponenten darstellen. In LORASR ist  $dz$  gleich dem Abstand zwischen zwei aufeinanderfolgenden Rechenschritten. Dabei haben die verschiedenen Elemente wie Gaps, Driftstrecken oder Linsen zum Teil deutlich unterschiedliche Ortsauflösungen  $dz$ .



**Abbildung 63** Beispielrechnung zum LORASR-Diagramm ‘9’: Im oberen Teil werden die X-Z-Enveloppen in rot und die Y-Z- Enveloppen in grün dargestellt. Im unteren Teil wird die Verlustrate  $(dN/N_0)/dz$  entlang der Strahlachse aufgezeichnet.



**Abbildung 64** Numerisches Beispiel zur Berechnung der Verlustrate  $(dN/N_0)/dz$ .

Da der numerische Wert der Größe  $(dN/N_0)/dz$  keine besonders anschauliche Bedeutung hat, wird in Abbildung 64 ein Rechenbeispiel zur Erklärung herangezogen. Es handelt sich um einen Ausschnitt des bereits in Abbildung 63 gezeigten Verlustprofil-Diagramms, wobei die Struktur der Verlustanteile um  $z = 7.15 \text{ m}$  besser sichtbar wird. Der Zahlenwert  $(dN/N_0)/dz = 1.372 \text{ m}^{-1}$  im Maximum kommt also dadurch zustande, dass 31 von ursprünglich 1000 Makroteilchen entlang einer Strecke  $dz = 0.0226 \text{ m}$  verloren gehen.

Bei bekanntem Strahlstrom  $I$  kann der Parameter  $(dN/N_0)/dz$  in einen Verluststrom / Länge und schließlich bei bekannter Teilchenenergie in eine Verlustleistung / Länge überführt werden, wie mit Gleichung (6.2) angedeutet.

$$\frac{(dN/N_0)}{dz} \left[ \frac{1}{m} \right] \rightarrow \frac{dI}{dz} \left[ \frac{A}{m} \right] \rightarrow \frac{dP}{dz} \left[ \frac{W}{m} \right] \quad (6.2)$$

Auf die Darstellung dieser Größen wurde in LORASR aber verzichtet, weil insbesondere die Verlustleistung pro Länge  $\frac{dP}{dz}(z)$  mit steigender Teilchenenergie tendenziell anwachsende Kurvenwerte zur Folge hätte. Ist die Anzahl der verlorenen Makroteilchen von primärer Bedeutung für das Design, so liefert die energieunabhängige Größe  $(dN/N_0)/dz$  eine optimale Darstellung des Verlustprofils..

### Gemeinsame maximale Strahlenveloppen sowie gemittelte Verlustprofile (Diagramm '10')

Ein neues LORASR-Diagramm, welches nur im Zusammenhang mit Fehlertoleranzanalysen (Batch-Modus) verfügbar ist, wird in Abbildung 65 gezeigt. Obwohl das Diagramm vom Aufbau her Ähnlichkeiten mit Abbildung 63 aufweist, sind die dargestellten Inhalte grundverschieden: In Abbildung 65 werden in grün die Enveloppen eines einzigen Simulationslaufes ohne Maschinenfehler (also des „Idealfalls“) dargestellt. Die roten Enveloppen sind dagegen durch Superposition aller Enveloppen der Einzelläufe mit Maschinenfehlern entstanden. Sie bilden somit eine Einhüllende aller Einzelläufe und können als „Worst Case“ oder als maximale Wahrscheinlichkeit des Strahlverlaufs für alle untersuchten Kombinationen von Maschinenfehlern interpretiert werden.

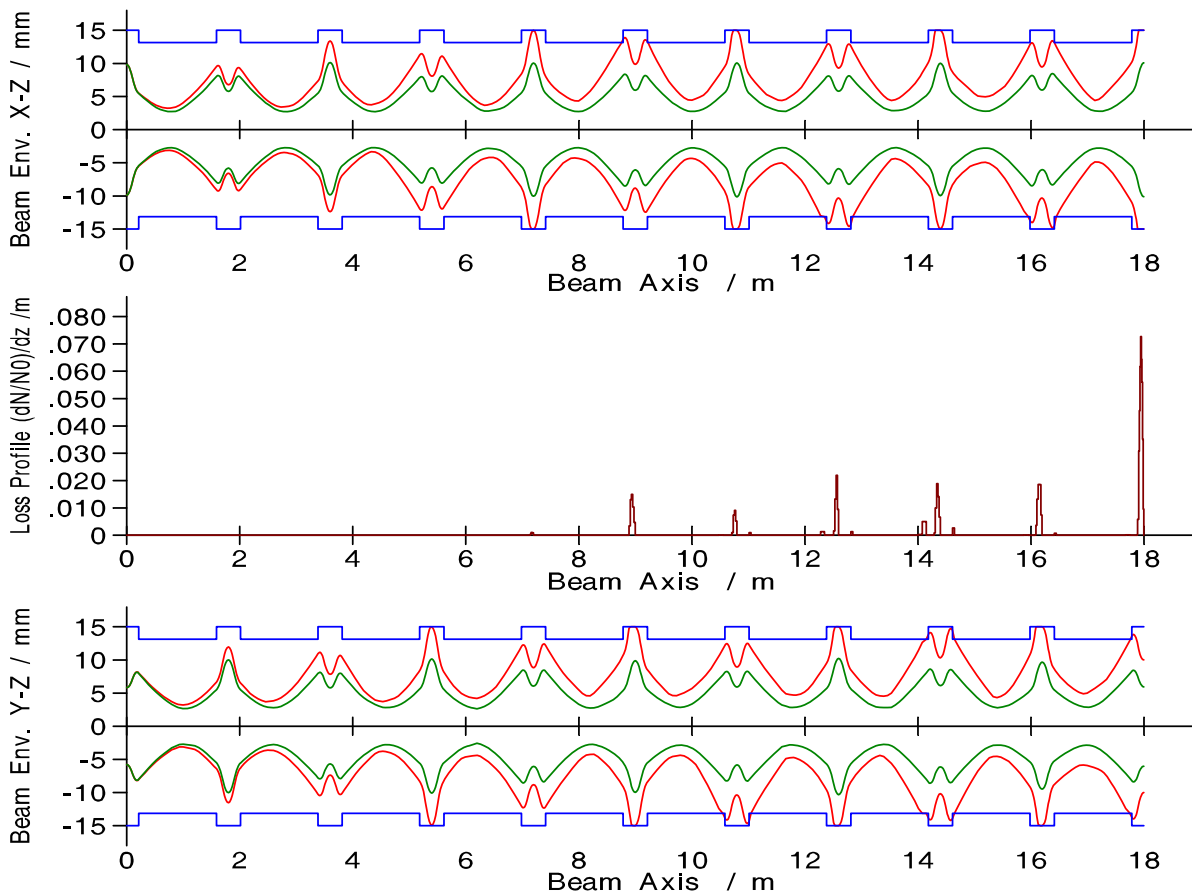
Bei der Ermittlung der Verlustraten werden gemäß Gleichung (6.3) die Verlustanteile  $(dN_i/N_0)/dz$  aller Läufe aufsummiert und anschließend durch die Anzahl  $n$  der Läufe geteilt.



$$\frac{1}{n} \sum_i \frac{(dN_i / N_0)}{dz} = \frac{\text{Summe der Verluste pro Meter aus allen Läufen}}{\text{Anzahl } n \text{ der Läufe}} \left[ \frac{1}{m} \right] \quad (6.3)$$

Durch die Bildung des Mittelwertes sind die absoluten Zahlenwerte des Parameters  $\overline{(dN/N_0)}/dz$  viel kleiner im Vergleich zu den Ergebnissen aus den Einzelläufen (vergl. Abbildung 63). Die Hauptgründe hierfür sind, dass die Teilchenverluste von Lauf zu Lauf an verschiedenen Stellen auftreten können und dass die Mehrzahl der Simulationsläufe in der Regel relativ geringe Teilchenverluste aufweisen.

Die prinzipiellen Unterschiede zu den Verlustprofilen aus Einzelläufen erkennt man durch Vergleich der Ergebnisse aus Abbildung 63 und Abbildung 65, wobei Abbildung 63 einen von 1000 Läufen darstellt, welche zur Berechnung der Enveloppen und Verlustprofile aus Abbildung 65 herangezogen wurden: Der maximale Verlustwert  $(dN/N_0)/dz = 1.372 \text{ m}^{-1}$  bei  $z \approx 7.1 \text{ m}$  aus Abbildung 63 ist in Abbildung 65 um den Faktor 1000 kleiner und im Kurvenverlauf kaum noch zu erkennen, d.h. an der Stelle  $z \approx 7.1 \text{ m}$  treten offensichtlich in keinem anderen Lauf Verluste auf. Somit ist die Darstellung gemäß Abbildung 65 dafür geeignet, Häufungspunkte für die Verluste und somit Schwachstellen des strahldynamischen Designs ausfindig zu machen.



**Abbildung 65** Beispielrechnung zum LORASR-Diagramm ‘10’: Die Enveloppen für den ungestörten Fall werden jeweils in grün und die gemeinsamen Enveloppen aller Läufe mit Maschinenfehlern in rot dargestellt. Im mittleren Teil wird die gemittelte Verlustrate  $\overline{(dN/N_0)}/dz$  nach Gleichung (6.3) aufgezeichnet.

### 6.3.2. Wahrscheinlichkeitsverteilung des maximalen Apertur-Füllfaktors

Die Berechnung und Darstellung der gemeinsamen Strahlenveloppen aus mehreren Läufen gemäß LORASR-Diagramm '10' vermittelt nur einen qualitativen Eindruck über die maximale Ausleuchtung der verfügbaren Beschleunigerapertur aufgrund von Maschinenfehlern. Insbesondere bei größeren und über die gesamte Länge des Beschleunigers verteilten Verlusten kann die kollektive Strahlenvelope fast deckungsgleich mit dem Aperturverlauf (in Abbildung 63 bis Abbildung 66 in blau dargestellt) sein, so dass in diesem Fall der Informationsgehalt von Diagramm '10' entsprechend sinkt.

Deshalb wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit eine weitere Analyse- und Darstellungsoption entwickelt, und zwar die Wahrscheinlichkeitsverteilung des maximalen Apertur-Füllfaktors.

Der Apertur-Füllfaktor  $f(z)$  ist gemäß Gleichung (6.4) als Verhältnis zwischen Radius  $r$  der Strahlenvelope und Beschleunigerapertur  $a$  an jedem Ort  $z$  entlang der Strahlachse definiert.

$$f(z) = \frac{r_{beam}(z)}{a_{beamline}(z)} \quad [ ] \quad (6.4)$$

Es ist also  $f(z) = 1$ , wenn der Strahl die Apertur berührt.

Für die in LORASR implementierte statistische Auswertung wird nicht der gesamte Verlauf  $f(z)$  protokolliert, sondern nur der maximale Apertur-Füllfaktor  $f_{max}$  für jeden Simulationslauf:

$$f_{max} = MAX(f(z), z = 0..z_{max}) \quad (6.5)$$

Das Beispiel aus Abbildung 66 lässt erkennen, dass  $f_{max}$  durch die „engste“ Stelle entlang des Strahlgangs bestimmt wird und der Zahlenwert von  $f_{max}$  keinen Rückschluss auf Parameter wie zum Beispiel den mittleren Füllfaktor  $\overline{f(z)}$  zulässt.

Diese „Worst Case“-Betrachtung ist aus folgenden Gründen beabsichtigt: Die Einführung eines „unkritischen“ Parameters wie des mittleren Füllfaktors  $\overline{f(z)}$  (typische Werte liegen zwischen 0.3 und 0.5) würde in vielen Fällen eine sichere strahldynamische Auslegung suggerieren, was bestenfalls auf den ungestörten Fall zutrifft. Beim Einschalten von Maschinenfehlern können aber zusätzliche Enveloppenoszillationen auftreten (vergl. Abbildung 66) und die damit verbundenen „Schwachstellen“ mit  $f(z) \cong f_{max}$  entlang des Beschleunigers sind alleinig für die Festlegung der Fehlertoleranzgrenzen von Bedeutung.

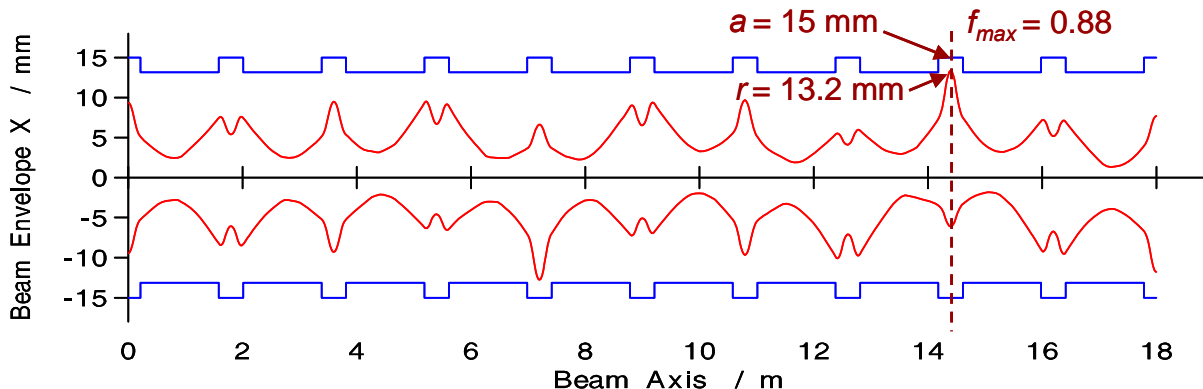
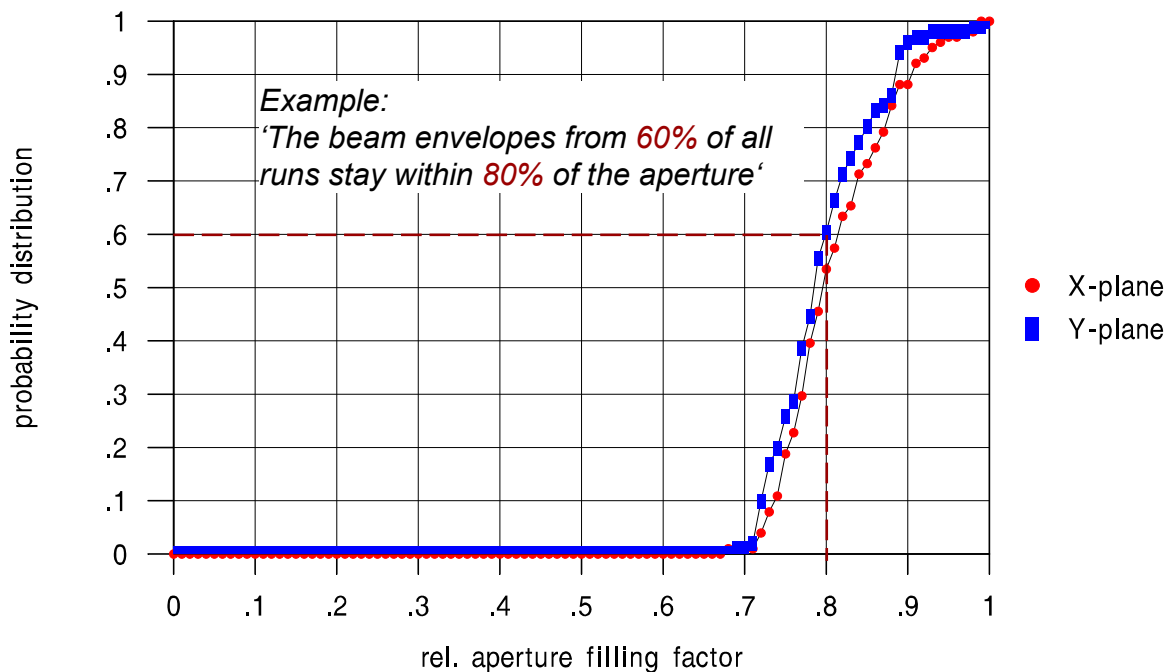


Abbildung 66 Beispiel zur Definition des maximalen Apertur-Füllfaktors.

Für die statistische Analyse wird  $f_{\max}(i)$  zu jedem Simulationslauf  $i$  bestimmt und die auf 1 normierte Apertur ( $a_{\max} \equiv 1$ ) in 100 gleiche Intervalle mit den Grenzen  $f_n$  unterteilt. Die maximalen Apertur-Füllfaktoren der Einzelläufe werden jeweils einem Intervall  $f_{\max}(i) \in [f_{n-1}, f_n]$  zugeordnet, um daraus eine Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(f_n)$  zu ermitteln. Daraus ergibt sich die Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion wie folgt:

$$P(f_n) \equiv P(f_{\max}(i) \leq f_n) = \sum_{k=1}^n \rho(f_k) \quad \text{mit} \quad f_k = \{0.01, 0.02, \dots, 0.99, 1.00\} \quad (6.6)$$

In Abbildung 67 wird ein numerisches Beispiel aus einer LORASR-Simulation dargestellt. Auf der X-Achse ist der Füllfaktor  $f$  und auf der Y-Achse die Wahrscheinlichkeit  $P(f)$  aufgetragen. Am Beispiel des Kurvenpunkts  $P(0.8) \cong 0.6$  lässt sich die Bedeutung dieser Darstellung wie folgt erklären: „In der Y-Z-Ebene hatten ca. 60% aller Simulationsläufe einen maximalen Apertur-Füllfaktor  $f_{\max} \leq 80\%$ “.



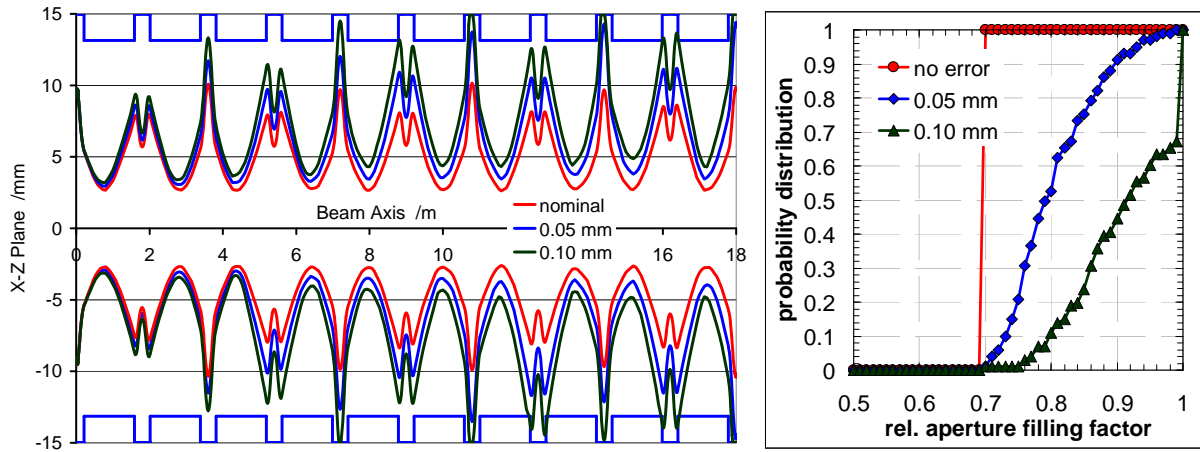
**Abbildung 67 Beispielrechnung zum LORASR-Diagramm ‘11’:  
Wahrscheinlichkeitsverteilung des maximalen Apertur-Füllfaktors.**

Somit enthält jeder Punkt des LORASR-Diagramms ‘11’ Informationen, welche über die rein qualitativen Aussagen vom LORASR-Diagramm ‘10’ hinausgehen. Dies wird auch beim direkten Vergleich beider Diagramme im Beispiel aus Abbildung 68 deutlich:

Es wurden Linsenversätze  $\Delta X_{\max} = 0.05 \text{ mm}$  und  $\Delta X_{\max} = 0.10 \text{ mm}$  untersucht und die Ergebnisse gemeinsam mit dem ungestörten Fall dargestellt. Für den ungestörten Fall (rote Kurven) wurde ein maximaler Füllfaktor  $f_{\max} \approx 0.7$  ermittelt. Dieser Fall ist für das LORASR-Diagramm ‘11’ trivial, d.h. alle Läufe mit  $\Delta X_{\max} = 0.00 \text{ mm}$  sind identisch, haben also den gleichen maximalen Apertur-Füllfaktor, so dass die Wahrscheinlichkeit  $P(f)$  an der Stelle  $f_{\max} \approx 0.7$  sprunghaft von 0.0 auf 1.0 steigt. Beim Fall mit  $\Delta X_{\max} = 0.05 \text{ mm}$  (blaue Kurven) ist anhand vom LORASR-Diagramm ‘10’ (Abbildung 68 links) nicht genau erkennbar, ob die Beschleunigerapertur berührt wird und ob es Läufe mit Teilchenverlusten gibt. Dagegen sieht man anhand der Wahrscheinlichkeitsverteilung aus Diagramm ‘11’, dass

die Bedingung  $P(1.0)=1.0$  gerade noch erfüllt wird, d.h. 99% aller Läufe haben eine Aperturausleuchtung  $f_{\max} < 100\%$  und nur bei 1% der Läufe wird die Apertur berührt.

Beim Fall mit  $\Delta X_{\max} = 0.10$  mm (grüne Kurven) ist anhand vom LORASR-Diagramm ‘10’ noch erkennbar, dass die Beschleunigerapertur an verschiedenen Stellen berührt wird. Quantitative Aussagen über die Größe der Verluste sind aber nicht möglich. Hingegen sagt Diagramm ‘11’ aus, dass ca. 66% aller Läufe die Apertur voll ausleuchten (also  $P(1.0) \approx 0.66$ ), so dass bei den restlichen 34% der Läufe auch noch Teilchenverluste auftreten.



**Abbildung 68** Vergleich des Informationsgehaltes von LORASR-Diagramm ‘10’ (links) und LORASR-Diagramm ‘11’ (rechts) für den ungestörten Fall (rot) sowie für verschiedene Fehler-Höchstgrenzen, und zwar Linsenversätze  $\Delta X_{\max} = 0.05$  mm (blau) und  $\Delta X_{\max} = 0.10$  mm (grün).

Anhand dieses Beispiels konnte die Leistungsstärke des LORASR-Diagramms ‘11’ aufgezeigt werden. Wahrscheinlichkeitsverteilungen des maximalen Strahlradius sind daher ein beliebter Parameter für die Quantifizierung von Maschinenfehlern und werden immer wieder gerne zur Darstellung der Ergebnisse von Fehlertoleranzstudien eingesetzt [77,81,82].

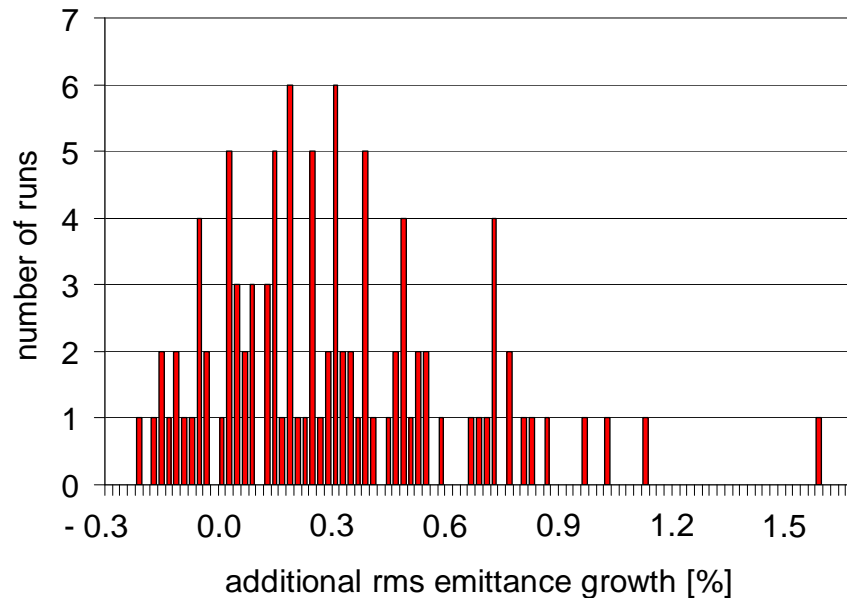
### 6.3.3. Wahrscheinlichkeitsverteilung des zusätzlichen RMS-Emittanzwachstums

Ein weiteres nützliches Werkzeug zur Beurteilung des Einflusses von Maschinenfehlern auf die Strahlqualität ist die statistische Analyse des zusätzlichen RMS-Emittanzwachstums, welcher wie folgt definiert ist:

$$\Delta \varepsilon = \frac{\Delta \varepsilon_{\text{error}} - \Delta \varepsilon_{\text{nominal}}}{\Delta \varepsilon_{\text{nominal}}} \quad (6.7)$$

Dabei ist  $\Delta \varepsilon_{\text{nominal}}$  das Emittanzwachstum des ungestörten Simulationslaufes und  $\Delta \varepsilon_{\text{error}}$  das Emittanzwachstum eines Laufes mit eingeschalteten Maschinenfehlern. Die Größe  $\Delta \varepsilon$  beziffert also den Unterschied im Emittanzwachstum bezogen auf den ungestörten Fall. Für die statistische Analyse (LORASR-Diagramm ‘12’, vergl. Abbildung 69) wird  $\Delta \varepsilon$  zu jedem Simulationslauf  $i$  berechnet und, analog zu dem für LORASR-Diagramm ‘11’ angewandten und in Kapitel 6.3.2 beschriebenen Verfahren, einem Intervall  $\Delta \varepsilon(i) \in [\Delta \varepsilon_{n-1}, \Delta \varepsilon_n]$  zugeordnet. Anders als für Diagramm ‘11’ ist die Anzahl  $n$  der Intervalle sowie die Intervallgröße nicht im Vorhinein festgelegt, sondern wird abhängig von der Anzahl  $i$  der

Simulationsläufe und der Streuung der Ergebnisse von Fall zu Fall angepasst mit dem Ziel, genügend Ereignisse im Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung  $N_R(\Delta\varepsilon_n)$  zu erhalten. Ein Beispiel hierzu ist in Abbildung 69 zu sehen: Hier wurden Anzahl und Größe der Intervalle so gewählt, dass die beiden Maxima aus je 6 von 100 Simulationsläufen gebildet werden.



**Abbildung 69** Beispielrechnung zum LORASR-Diagramm ‘12’: Wahrscheinlichkeitsverteilung des zusätzlichen RMS-Emittanzwachstums.

Wie man aus Abbildung 69 erkennt, kann  $\Delta\varepsilon$  auch negativ werden. Dies ist zum Beispiel der Fall, wenn  $\Delta\varepsilon_{nominal}$  bereits so groß ist, dass einzelne Simulationsläufe mit eingeschalteten Maschinenfehlern im Emittanzwachstum sogar noch darunter liegen. Noch wahrscheinlicher ist der Fall, dass bei eingeschalteten Maschinenfehlern beträchtliche Teilchenverluste auftreten, so dass die verbliebenen Teilchen kleinere RMS-Emittanzen ergeben. In diesem Fall wäre jedoch die statistische Auswertung bedeutungslos.

Man erkennt außerdem am Beispiel aus Abbildung 69 näherungsweise die Form einer maxwellischen Geschwindigkeitsverteilung für den Verlauf des zusätzlichen Emittanzwachstums, d.h. man hat eine Häufung von mittleren Wachstumsraten mit einem ausgeprägten Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte, sowie relativ wenig Läufe mit einem sehr kleinen oder sehr großen zusätzlichen Emittanzwachstum.

Auch diese Art der statistischen Auswertung von Fehlertoleranzstudien ist weit verbreitet. Alle publizierten Ergebnisse bestätigen den in Abbildung 69 gezeigten typischen Verlauf einer Maxwellverteilung [75,83].

Der Grund hierfür ist – soweit dem Autor bekannt – noch nicht systematisch erforscht worden. Es ist aber plausibel, dass dieser Verlauf die statistische Natur der Verteilung von Maschinenfehlern widerspiegelt: Viele der möglichen Kombinationen von Maschinenfehlern rufen vergleichbare Emittanzwachstumsraten hervor und bestimmen somit das Maximum der Wahrscheinlichkeitsverteilung (die Lage des Maximums hängt wiederum von der absoluten Größe der Maschinenfehler ab). Dagegen gibt es vergleichsweise wenige Kombinationen von Maschinenfehlern, bei welchen das resultierende Emittanzwachstum sehr gering oder sehr groß ist.

## 7. Anwendungsbeispiele

### 7.1. Anwendungspotential der entwickelten Simulationswerkzeuge

Die primäre Zielsetzung der vorliegenden Arbeit liegt in der Entwicklung von Simulationswerkzeugen für die strahldynamische Auslegung von hochintensiven Linearbeschleunigern. Es handelt sich dabei im Wesentlichen um die in Kapitel 4 vorgestellten PIC FFT Routine zur Berechnung der Raumladungskräfte des Strahls sowie um die in Kapitel 6 vorgestellten Simulationswerkzeuge zum Aufprägen von Maschinenfehlern. Der Bezug zu praktischen Anwendungen ist durch die Integration dieser Routinen in das Simulationsprogramm LORASR gegeben. Dadurch wurde es prinzipiell ermöglicht, effektive Teilchensimulationsrechnungen mit bis zu  $10^6$  Simulationsteilchen mit genauer Quantifizierung der Verluste sowie Fehlertoleranzstudien durchzuführen.

Die aus den Forschungsaktivitäten des Instituts für Angewandte Physik resultierenden Anwendungen haben die Arbeitsschwerpunkte der vorliegenden Dissertation mitgeprägt und diese somit in gegenseitiger Wechselwirkung motiviert und vorangetrieben. So können einige abgeschlossene Dissertationen der vergangenen Jahre genannt werden, bei welchen strahldynamische Auslegungen mit LORASR eine wesentliche Rolle spielten, so dass diese direkt vom verbesserten Leistungspotential des Programms profitiert haben. Die drei exemplarisch ausgewählten Beispiele hatten als Thema Komponentenentwicklungen oder Designstudien zu folgenden Projekten:

- Design und Aufbau der IH-Beschleunigerkavität für die Heidelberger Ionenstrahl-Therapieanlage [84].
- Ausarbeitung eines Frankfurter Designvorschlags für den IFMIF Beschleuniger basierend auf normal- und supraleitenden IH- und CH-Kavitäten [11].
- Strahldynamische Auslegung sowie Entwicklung einer gekoppelten normalleitenden CH-Kavität für den FAIR-Protonenlinac [85].

Da Anwendungsbeispiele am besten dafür geeignet sind, den Nutzen einer Entwicklung zu verdeutlichen und zu belegen, werden im vorliegenden Kapitel die drei obengenannten Projekte jeweils kurz vorgestellt. Sie wurden als Anwendungsbeispiele ausgewählt, da sie vielerlei Rückwirkungen auf die Auslegung der neuen LORASR-Routinen sowie auf die graphische Darstellung der Ergebnisse hatten.

Die Hauptzuständigkeit für die gezeigten Simulationen lag im Falle des neuen IFMIF-Designs bei C. Zhang [10] und für den FAIR-Protonenlinac bei G. Clemente [85].

## 7.2. Überprüfung der Maschinenfehler-Toleranzen am Linearbeschleuniger für die Heidelberger Ionenstrahl-Therapie (HIT)

Das Heidelberger Ionenstrahl-Therapiezentrum HIT ist eine Beschleunigeranlage für die Tumorthherapie mit Protonen- und Ionenstrahlen (He, C, O), welche an der Radiologischen Universitätsklinik in Heidelberg aufgebaut wurde und im Laufe des Jahres 2009 Patientenbestrahlung im Routinebetrieb aufnehmen wird.

Der Beschleuniger besteht aus zwei Niederenergie-Strahlführungszweigen, deren EZR-Ionenquellen jeweils für die Produktion bestimmter Teilchensorten (zum einen Protonen und He-Ionen und zum anderen C- und O-Ionen) optimiert sind, gefolgt von einer Radiofrequenz-Quadrupol-Struktur (RFQ) zur Beschleunigung von 8 keV/u auf 400 keV/u, einer IH-Driftröhrenstruktur mit der Endenergie von 7 MeV/u und schließlich einem 6.5 Tm Ringbeschleuniger (Synchrotron) zur Beschleunigung auf die benötigte Endenergie im Bereich zwischen 50 und 430 MeV/u. Der von der GSI Darmstadt geplante und unter Mitwirkung des IAP Frankfurt aufgebaute Beschleuniger ist auch unter dem Namen „Heavy Ion Cancer Therapy Facility“ (HICAT) bekannt [86].

Die Zuständigkeiten des IAP Frankfurt in Bezug auf die IH-Driftröhrenstruktur erstreckten sich von der strahldynamischen Auslegung mit dem Simulationsprogramm LORASR, über elektromagnetische Strukturauslegung mit CST Microwave Studio<sup>®</sup> sowie Messungen an einem Hochfrequenzmodell [6, 84], bis hin zur Begleitung während des gesamten Fertigungsablaufes und der endgültigen HF-Abstimmung der Kavität [87].

**Tabelle 7-1 Hauptparameter des Driftröhren-Linearbeschleunigers für die Heidelberger Ionenstrahl-Therapie (HIT).**

Parameter	Wert
Resonanzfrequenz	216.816 MHz
Designteilchen	$^{12}\text{C}^{4+}$
Design-Strahlstrom	100 $\mu\text{A}$ ( $^{12}\text{C}^{6+}$ )
Tastverhältnis	0.15 % (300 $\mu\text{s}$ $\times$ 5 Hz)
Energiebereich (Driftröhrenstruktur)	0.4 – 7.0 MeV/u
Driftröhrenstruktur	1 normalleitende IH-Kavität
Länge der Driftröhrenstruktur	3.77 m
<b>Normierte Ausgangsemittanzen</b>	
$\mathcal{E}_{\text{tr},95\%}$	0.8 mm mrad
$\mathcal{E}_{\text{tr,rms}}$	0.13 mm mrad
$\mathcal{E}_{\text{long},95\%}$	2.9 keV/u·ns
$\mathcal{E}_{\text{long,rms}}$	0.3 keV/u·ns

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden Untersuchungen anhand gemessener Strukturdaten der IH-Kavität durchgeführt, deren Ergebnisse wie folgt vorgestellt werden:

- Es wurde anhand von LORASR-Simulationen überprüft, ob die erzielte Fabrikations- und Justagegenauigkeit der Quadrupollinsen (vergl. Tabelle 7-2) im Hinblick auf den Strahlbetrieb akzeptabel ist.

- Die gleiche Fragestellung wurde anhand der endgültig gemessenen Spaltspannungsverteilung der IH-Kavität (vergl. Tabelle 7-3) untersucht.

### **Untersuchung der Auswirkung gemessener Fehljustagen der Quadrupollinsen auf die transversale Strahldynamik**

Die in Tabelle 7-2 aufgelisteten Ablagen  $\Delta X$  und  $\Delta Y$  einzelner Singulett von der Strahlachse ergeben sich aus der Überlagerung der Beiträge aus Fabrikations- und Justagefehlern. Da es sich in diesem Fall um tankinterne Linsen handelt, welche zudem als Triplett in gemeinsamen Gehäusen untergebracht sind, konnten die aus Fabrikationsfehlern entstandenen Abweichungen der Singulett relativ zueinander nicht mehr korrigiert werden. Die Aufgabe der Triplett-Justage bestand somit darin, eine optimale Positionierung der gemeinsamen Achse des jeweiligen Triplett in der X-Y-Ebene zu finden, bei welcher einzelne Singulett nicht zu große Abweichungen  $\Delta X$  und  $\Delta Y$  aufweisen. Dabei kann im Allgemeinen die Minimierung der Ablagen  $\Delta X$  und  $\Delta Y$  eines Singulett die gleichzeitige Verschlechterung dieser Werte für die beiden anderen Singulett einer Triplettlinse zur Folge haben.

Wie man aus Tabelle 7-2 ersehen kann, konnte durch Justage  $|\Delta X| \leq 0.3 \text{ mm}$  und  $|\Delta Y| \leq 0.2 \text{ mm}$  erreicht werden. Jedoch hätten laut Ausschreibung Toleranzen unter  $0.1 \text{ mm}$  eingehalten werden müssen. Somit stellte sich die Frage, ob die Nichteinhaltung dieser vorgegebenen Grenzwerte ein schwerwiegendes Problem für die Strahldynamik in der IH-Kavität darstellen würde. In diesem Fall wären Nachbesserungen der Linsen erforderlich, verbunden mit Zusatzkosten und möglichen Verzögerungen bei der Inbetriebnahme.

**Tabelle 7-2 Ablagen  $\Delta X$  und  $\Delta Y$  der tankinternen Quadrupollinsen in Bezug auf die Strahlachse, aus entsprechenden Messprotokollen entnommen.**

<b>Singulett</b>	<b><math>\Delta X</math> [mm]</b>	<b><math>\Delta Y</math> [mm]</b>
Q11	+0.12	+0.05
Q12	+0.05	+0.05
Q13	-0.23	+0.00
Q21	-0.05	+0.00
Q22	-0.30	+0.12
Q23	-0.27	+0.03
Q31	+0.00	+0.15
Q32	-0.05	+0.16
Q33	-0.08	+0.20

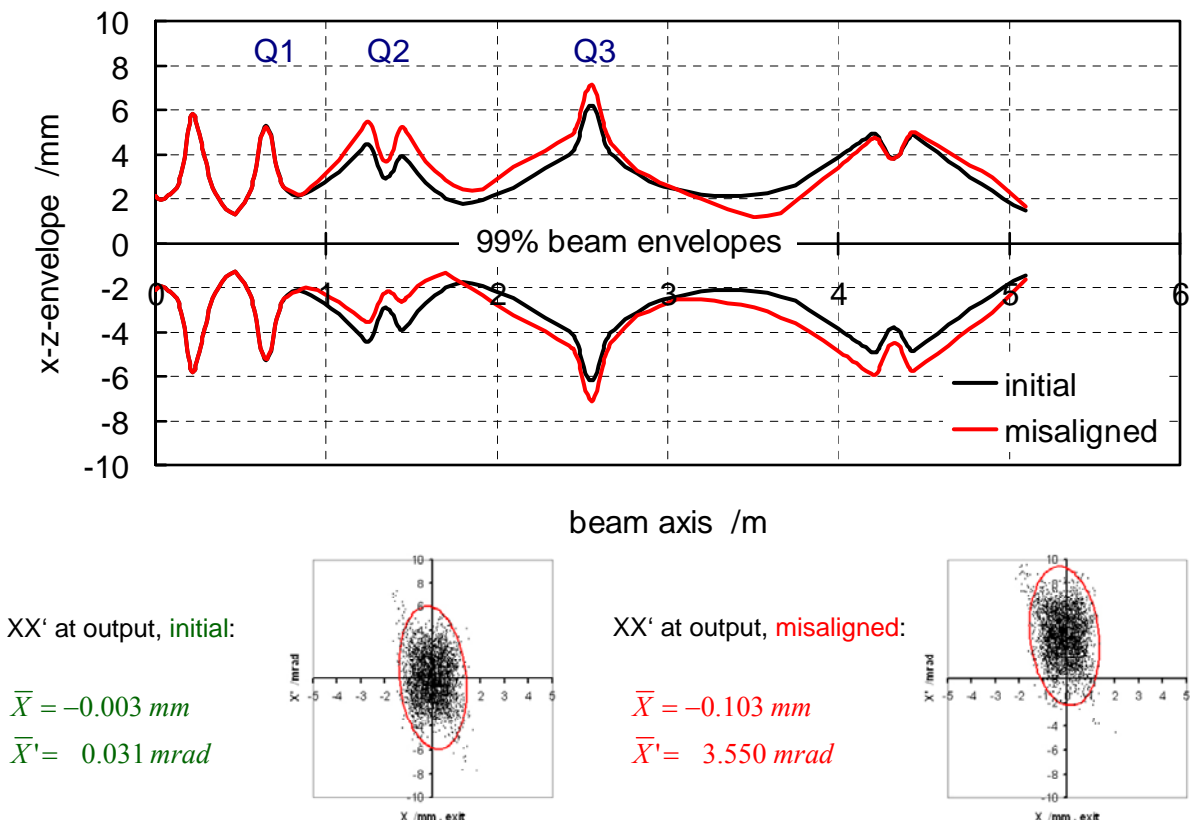
Die Ergebnisse der durchgeführten LORASR-Simulationen konnten diesbezüglich eine „Entwarnung“ geben: Man erkennt in Abbildung 70 eine unwesentliche Enveloppenoszillation mit maximalen Abweichungen von der Sollenvolpe im Bereich des IH-internen Triplett „Q2“ sowie am Ende des untersuchten Abschnittes (externe Triplettlinse hinter der IH-Struktur). Erfreulicherweise heben sich die aus den Achsenablagen aller Linsen



resultierenden Effekte in diesem Fall gegenseitig auf, so dass der Strahl keine einseitige Ablenkung erfährt, sondern am Ausgang des untersuchten Abschnittes im Ortsraum fast deckungsgleich mit der Envelope des Sollfalls ist. Jedoch weist der Ausgangsstrahl eine Winkelablage in Form einer zusätzlichen Komponente  $\bar{X}' = 3.55$  mrad auf. Dieser Strahl würde also ohne Korrekturmaßnahmen im weiteren Verlauf von der Hauptachse des Beschleunigers wegdriften. Jedoch lässt sich ein solcher Fehler in der Praxis relativ leicht mit sogenannten „Steeringmagneten“ beheben.

Weiterhin ist positiv zu vermerken, dass die Rechnung mit Linsenversatz fast identische Werte für die RMS-Emittanz am Ausgang (0.132 gegenüber 0.131 mm·mrad für den Sollfall) sowie für die Transmission (99.79% gegenüber 99.82%) liefert.

Im Übrigen lieferte die Untersuchung analoge Ergebnisse für die vertikale Ebene.



**Abbildung 70** Ergebnisse der Fehleranalyse für die horizontale Ebene bei Eingabe der Linsenversatzwerte aus Tabelle 7-2.

### Untersuchung der Auswirkung gemessener Abweichungen von der vorgegebenen Spaltspannungsverteilung auf die longitudinale Strahldynamik

Die nach mehreren Optimierungsschritten erzielte finale Abstimmungsgenauigkeit der Spaltspannungsverteilung der IH-Struktur für HICAT ist aus Abbildung 71 qualitativ erkennbar. Einige Zahlenwerte wurden zur Veranschaulichung in Tabelle 7-3 aufgelistet. Darin werden mit  $V_{eff}$  die Sollwerte in MV bezeichnet. Der Faktor für die relative

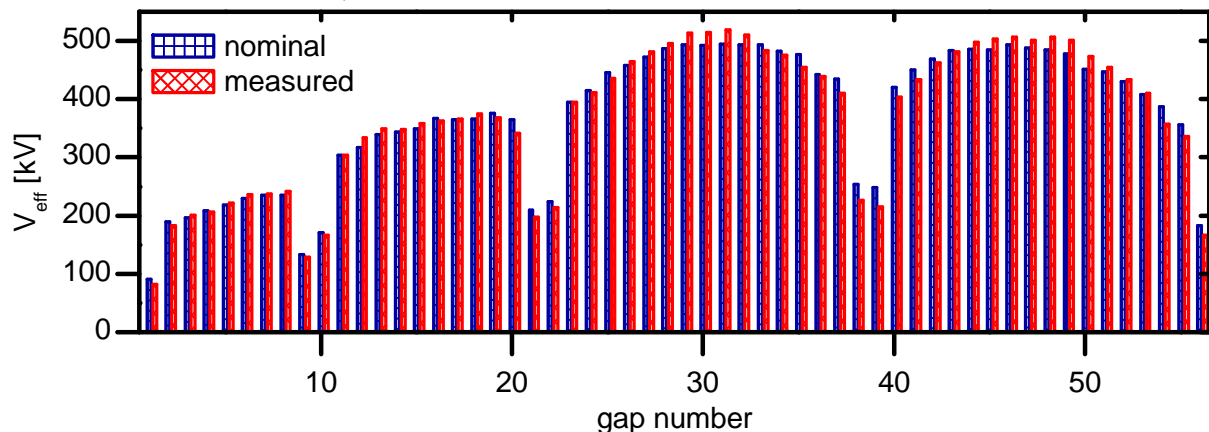
Abweichung des gemessenen vom jeweiligen Sollwert berechnet sich aus:  $fact = \frac{V_{Messung}}{V_{eff}}$

Für weitere Details zur Abstimmung der IH-Kavität und die dafür erforderlichen Maßnahmen und Iterationsschritte sei auf die Referenz [87] verwiesen.

**Tabelle 7-3 Für die Eingabe in LORASR verwendete Spaltspannungsverteilung (Auszug). Mit „Veff“ werden die Sollwerte in MV und mit „fact“ die aus den gemessenen Werten resultierenden Korrekturfaktoren bezeichnet:**  
 $V_{\text{Messung}} = V_{\text{eff}} \times \text{fact}$

gap no.	Veff	fact	gap no.	Veff	fact
1	0.0914	0.895	---	-----	-----
2	0.1892	0.968	50	0.4518	1.048
3	0.1961	1.024	51	0.4466	1.017
4	0.2085	0.991	52	0.4301	1.009
5	0.2185	1.014	53	0.4079	1.006
6	0.2290	1.031	54	0.3866	0.923
7	0.2356	1.009	55	0.3558	0.944
---	-----	-----	56	0.1835	0.907

Obwohl Abbildung 71 den optischen Eindruck einer sehr guten Übereinstimmung vermittelt (was auch weitgehend der Fall ist), gibt es vereinzelt Gaps mit einer relativen Abweichung von 10 – 15 %. Die Mehrzahl der gemessenen Gapspannungen weicht jedoch um weniger als 5% von den Sollwerten ab, wie auch aus Tabelle 7-3 zu erkennen ist.



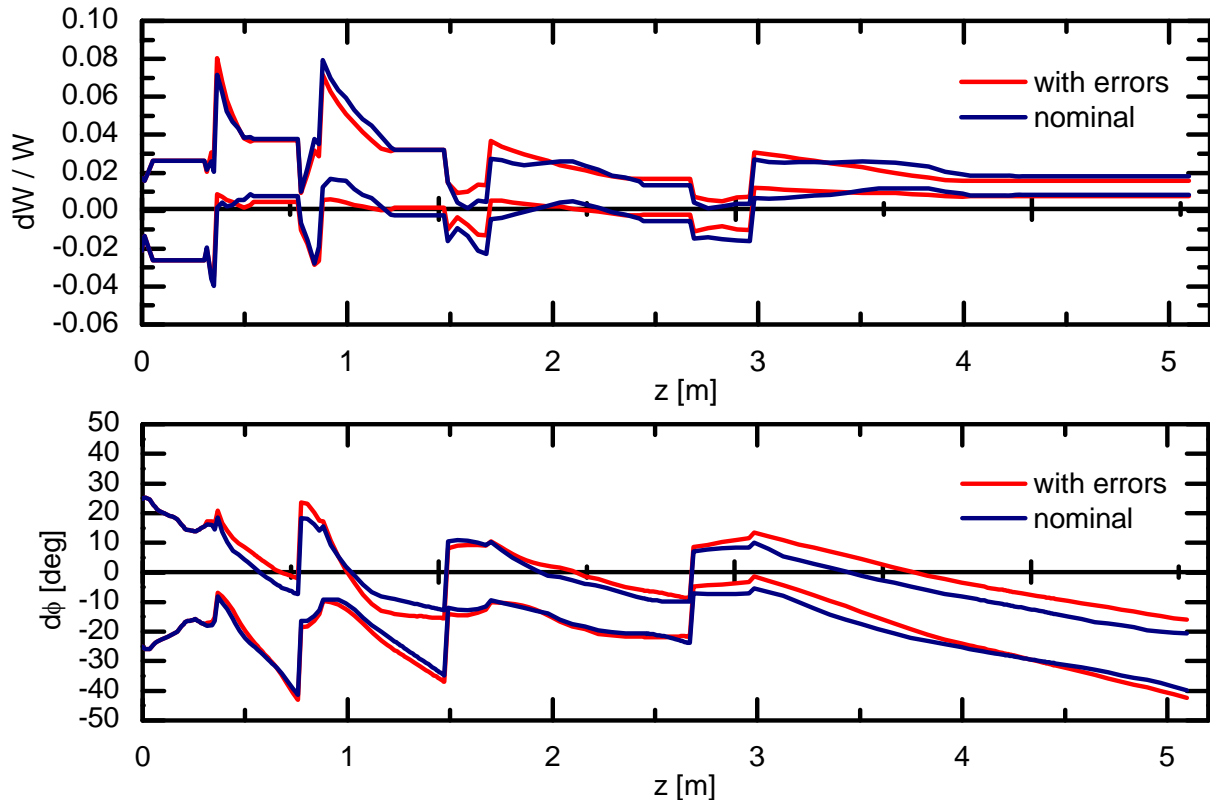
**Abbildung 71 Erzielte Abstimmgenauigkeit der IH-Kavität für die Heidelberger Ionenstrahl-Therapie: Vergleich der gemessenen (rot) mit der vorgegebenen Spaltspannungsverteilung (blau).**

Es stellte sich auch hier die Frage, ob diese Abweichungen aus strahldynamischer Sicht noch akzeptabel sind.

Jede vom Sollwert abweichende Spaltspannung hat eine Abweichung des Energiegewinns im Spalt zur Folge. Dadurch ändert sich auch die Laufzeit des Bunches bis zur nächsten Spaltmitte, so dass auch eine Abweichung von der Sollphase im darauffolgenden Spalt eintritt. Folglich ist eine Oszillation des Bunches im longitudinalen Phasenraum zu beobachten, wie bereits im Kapitel 6.2.3 ausgeführt wurde.

Wie man aber aus Abbildung 72 und Abbildung 73 erkennen kann, fallen die Unterschiede zur Rechnung mit Sollspannungswerten sowohl bei den longitudinalen Strahlenveloppen als auch bei der longitudinalen Ausgangsverteilung kaum ins Gewicht: Eine zusätzliche Enveloppenoszillation ist nicht zu beobachten, der Ausgangsstrahl hat die passende Schwerpunktennergie (was für den nachfolgenden Beschleunigerabschnitt von großer Bedeutung ist) und der Strahl hat eine mit der Sollrechnung vergleichbare Energiebreite. Lediglich die Phasenbreite ist leicht erhöht, was man aus Abbildung 73 sehr gut anhand der Größe und Orientierung der 99%-Ellipsenfläche erkennen kann.

Dieses Ergebnis führte wie im Falle der Justagefehler-Analyse dazu, dass aus strahldynamischer Sicht „grünes Licht“ für den Strahlbetrieb gegeben werden konnte.

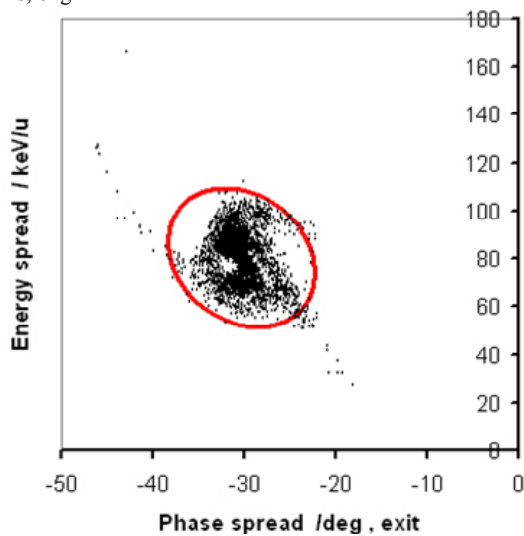


**Abbildung 72** Vergleich der longitudinalen Strahlenveloppen für Simulationen mit gemessener (rot) und vorgegebener Spaltspannungsverteilung (blau).

**Nominal case:**

transmission = 99.97 %

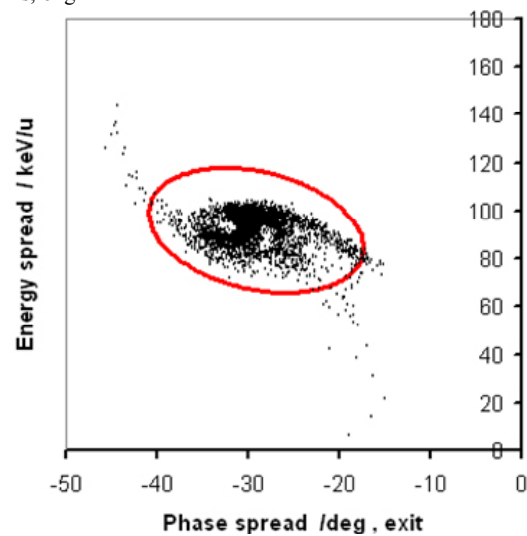
$\epsilon_{\text{rms,long}} = 0.308 \text{ keV/u} \cdot \text{ns}$



**With measured voltages:**

transmission = 99.87 %

$\epsilon_{\text{rms,long}} = 0.378 \text{ keV/u} \cdot \text{ns}$



**Abbildung 73** Vergleich der longitudinalen Teilchenverteilungen am Ausgang der IH-Kavität für Simulationen mit gemessener (rechts) und vorgegebener Spaltspannungsverteilung (links).

### 7.3. Neuer IAP-Vorschlag für einen 125 mA $D^+$ , 5-40 MeV supraleitenden CH-DTL für IFMIF

Die „International Fusion Material Irradiation Facility“ (IFMIF) [88] ist eine beschleunigerbasierte Deuterium-Lithium Neutronenquelle, welche einen hohen Fluss an 14 MeV Neutronen auf ein massives Target liefern soll, um geeignete Materialien für Fusionsreaktoren wie ITER zu untersuchen.

Zwei parallel angeordnete Linearbeschleuniger sollen einen Deuteronenstrahl mit einem Gesamtstrom von 250 mA am Lithium-Target im Dauerstrichbetrieb liefern.

Der aktuelle IAP-Vorschlag des IFMIF-Beschleunigers besteht aus einer normalleitenden IH- oder CH-Kavität für den Energiebereich 2.5 – 4.5 MeV/u, gefolgt von acht supraleitenden CH-Resonatoren für den Energiebereich 4.5 – 20 MeV/u. Alle Strukturen werden bei der Resonanzfrequenz 175 MHz betrieben.

**Tabelle 7-4 Hauptparameter des Driftröhren-Linearbeschleunigers für IFMIF.**

Parameter		Wert
Resonanzfrequenz		175 MHz
Designteilchen		$D^+$
Design-Strahlstrom		125 mA
Tastverhältnis		100 % (CW-Betrieb)
Energiebereich (Driftröhrenstruktur)		2.5 – 20 MeV/u
Driftröhrenstrukturen	1 normalleitende IH- oder CH-Kavität + 8 supraleitende CH-Kavitäten	
Länge des Driftröhrenbeschleunigers		$\approx 12$ m
<b>Ausgangsemittanzen</b>		
$\epsilon_{tr,rms}$		0.4 mm mrad (60% Wachstum)
$\epsilon_{long,rms}$		1.8 keV/u·ns (30% Wachstum)

In der Vergangenheit gab es am IAP bereits detaillierte Entwürfe zu einem supraleitenden IFMIF-Beschleuniger mit Quadrupol-Triplett-Fokussierung [9,11,88]. Hierzu wurde auch eine Fehlertoleranzanalyse durchgeführt [89].

Obwohl dieses ursprüngliche Design mit ungewöhnlich großen Driftröhren-Innendurchmessern von 30 mm im normalleitenden und 100 mm im supraleitenden Abschnitt entsprechende Sicherheiten in Bezug auf Teilchenverluste enthielt (die Transmission ohne Maschinenfehler lag folglich bei 100 %), waren einige Nachteile offenkundig:

- Remanente Magnetfelder aufgrund normalleitender Magnete.
- Moderate maximale Feldstärken von bis zu 1.3 T und dadurch bedingte große Baulängen der Linsen.
- Ungünstige warm-kalt Übergänge (zwischen Linsen bei Raumtemperatur und supraleitenden Kavitäten).
- Große Wachstumsraten der RMS-Emittanzen in allen drei Ebenen (bis zu 300 %).

Außerdem ergab die Toleranzanalyse [89] recht unrealistische maximal zulässige Fehlerwerte zur Erfüllung des 1 W/m Kriteriums, und zwar Linsen-Translationen  $\Delta X$ ,  $\Delta Y$  unter 0.05 mm,

Schwankungen der Tank -Spannungsamplituden  $\Delta U$  unter 1 % und Schwankungen der Tank-HF-Phase  $\Delta\phi$  unter  $1^\circ$ .

Aus diesen Gründen wurde ein neuer, im Folgenden vorgestellter Entwurf eines supraleitenden IFMIF-Beschleunigers ausgearbeitet, welcher auf supraleitende Solenoid-Fokussierung basiert [10]. Dieser weist eine Reihe von Vorteilen auf:

- Mit supraleitenden Solenoidlinsen können hohe Feldstärken von 5-15 T erreicht werden, wodurch die Baulänge erheblich reduziert wird.
- Kurze Driften zwischen den Kavitäten sind von großem Vorteil für die longitudinale KONUS-Strahldynamik (vergl. Kapitel 3.1).
- Auch die transversale Teilchenbewegung ist, wie man aus Abbildung 74 erkennt, weit unproblematischer: Da es keine defokussierenden Linsen gibt, sind die Enveloppenoszillationen weniger ausgeprägt als in einem Quadrupol-Triplett-Kanal und folglich können auch größere Abstände zur Apertur eingehalten werden.
- Schließlich sei noch das moderate RMS-Emittanzwachstum erwähnt, wie aus Abbildung 74 unten sichtbar: Etwa 60% Wachstum in den transversalen Ebenen sowie 30% in der longitudinalen Ebene sind vertretbare Werte für einen 125 mA Deuterium-Strahl.
- Aus mechanischer Sicht ist hervorzuheben, dass supraleitende Linsen zusammen mit den Kavitäten in gemeinsame Kryomodule integriert werden können. Dadurch ergibt sich eine sehr kompakte Bauweise mit wenigen warm-kalt Übergängen.

Das IFMIF Projekt stellt wegen der hohen Strahlintensitäten und des Dauerstrichbetriebes höchste Sicherheitsanforderungen in Bezug auf Teilchenverluste. Das 1 W/m Kriterium

bedeutet Verlustströme unter  $\frac{0.2}{W[MeV]} \mu A/m$  oder Verlustanteile unter  $\frac{8 \cdot 10^{-6}}{W[MeV]} /m$ .

Daher waren die Vermeidung von Teilchenverlusten sowie hohe Maschinenfehlertoleranzen höchststrangige Designkriterien des neuen Entwurfes.

Wie man aus Abbildung 74 erkennt, gibt es einen beträchtlichen „Sicherheitsabstand“ zwischen Strahlenveloppe und Beschleunigerapertur für den Sollfall (rote Kurve). Der nach Gleichungen (6.4) und (6.5) definierte maximale Apertur-Füllfaktor beträgt ungefähr 0.6 für die X-Z- sowie 0.7 für die Y-Z-Ebene. Die engste Stelle ist am Übergang zwischen normalleitendem und supraleitendem Abschnitt. Eine detaillierte Fehlertoleranzanalyse [10] wurde mit den Setzwerten aus Tabelle 7-5 durchgeführt.

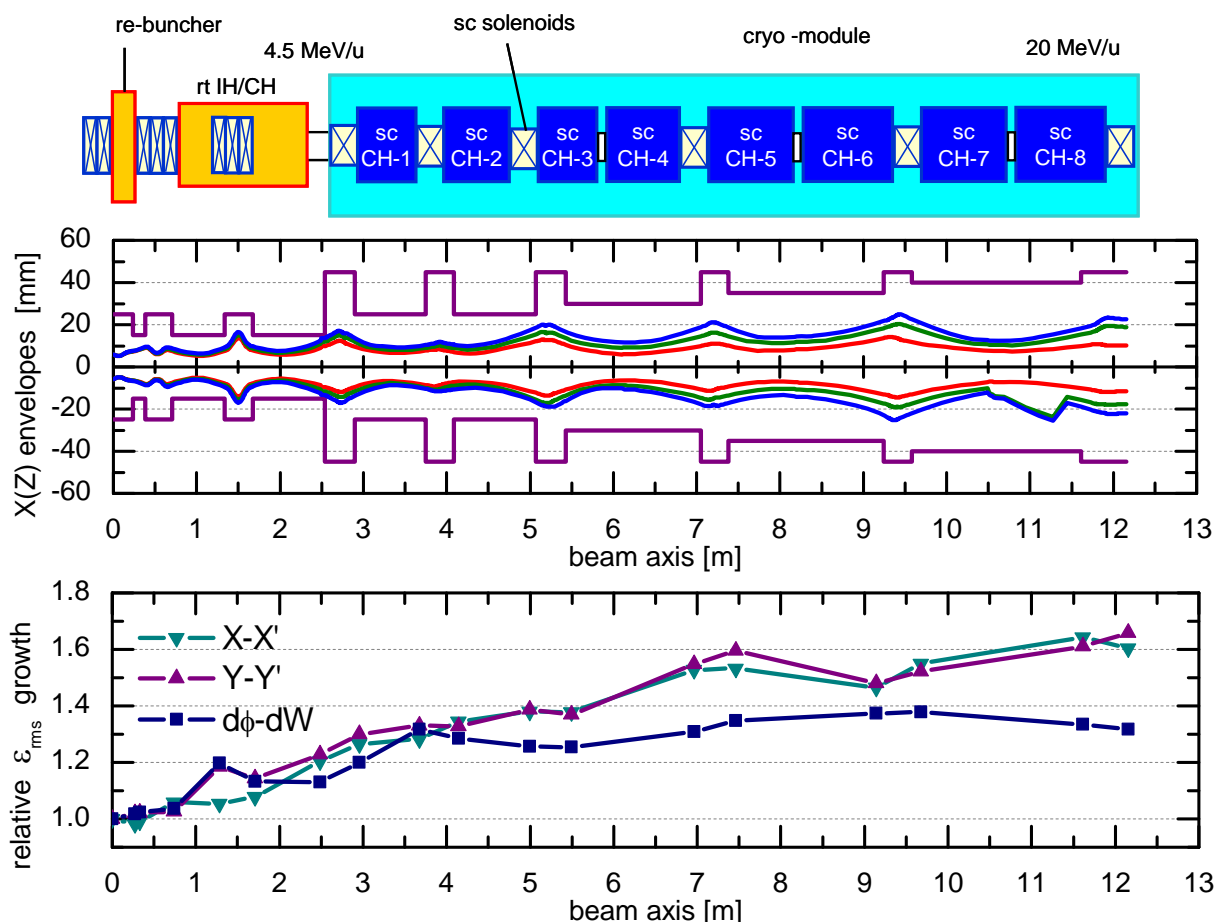
**Tabelle 7-5 Für die Toleranzstudie am IFMIF-Beschleuniger verwendete Fehlerarten und Fehlergrößen.**

Fehlerart	Wertebereich Einstellung 1	Wertebereich Einstellung 2
Linsen-Translationen $\Delta X, \Delta Y$ [mm]	$\leq 0.1$	$\leq 0.2$
Linsen-Rotationen $\Delta\phi_x, \Delta\phi_y, \Delta\phi_z$ [mrad]	$ \Delta\phi_x  \leq 1.5$ $ \Delta\phi_y  \leq 1.5$ $ \Delta\phi_z  \leq 2.5$	$ \Delta\phi_x  \leq 3.0$ $ \Delta\phi_y  \leq 3.0$ $ \Delta\phi_z  \leq 5.0$
Schwankungen der Tank- und Einzelspalt-Spannungsamplituden $\Delta U_{ij}$ [%]	$ \Delta U_{gap}  \leq 5.0$ $ \Delta U_{tank}  \leq 1.0$	$ \Delta U_{gap}  \leq 5.0$ $ \Delta U_{tank}  \leq 1.0$
Schwankungen der Tank-HF-Phase $\Delta\phi_i$ [ $^\circ$ ]	$\leq 1.0$	$\leq 1.0$

Trotz der deutlich erhöhten Fehlergrenzwerte (z.B. Linsentranslationen bis zu 0.2 mm, verglichen mit zulässigen 0.05 mm beim früheren Design) gab es in 100 Simulationsläufen mit je  $10^5$  Makroteilchen keine transversalen Teilchenverluste.

Der sichtbare Knick in den  $X(Z)$ -Enveloppen mit Maschinenfehlern bei  $Z \approx 11.3$  m rührt von 2 Makroteilchen her, welche bei einem von 100 Simulationsläufen in der longitudinalen Ebene verloren gingen. Es sei daran erinnert, dass die grünen und blauen Enveloppen aus Abbildung 74 die Einhüllenden aus 100 Läufen darstellen (LORASR-Diagramm '10', vergl. Kapitel 6.3.1). Da es sich um 100%-Enveloppen handelt, ist der Enveloppenknick sichtbar, obwohl lediglich 2 von  $100 \cdot 10^5 = 10^7$  Teilchen dafür ursächlich sind. Dieses Beispiel zeigt, dass eine Erweiterung des LORASR-Diagramms '10' sinnvoll wäre, mit frei wählbarer Prozentzahl von Teilchen (z.B. 99.999%) zur Bestimmung der gemeinsamen Envelope.

Schließlich sollte noch erwähnt werden, dass die Fehlertoleranzen des aktuellen IFMIF-Entwurfes in Wirklichkeit noch höher sein sollten, da das LORASR-Programm noch nicht die Möglichkeit bietet, Korrekturen unerwünschter Strahlablagen durch zusätzliche Steeringmagnete zu simulieren.



**Abbildung 74** Oben: Schematischer Aufbau des IAP-Vorschlages für den IFMIF-Beschleuniger.

Mitte: 100% Strahlenveloppen (rot: Sollfall; grün und blau: gemeinsame Enveloppen aus 100 Läufen mit je  $10^5$  Makroteilchen und den Fehlergrößen aus Tabelle 7-5).

Unten: Relatives RMS-Emittanzwachstum für den Sollfall.

Design: C. Zhang

#### 7.4. Aktuelles Design mit Fehlertoleranzanalyse für den 45 mA, 3-70 MeV Protoneninjektor für GSI-FAIR

Für die im Aufbau befindliche internationale Beschleunigeranlage FAIR („Facility for Antiproton and Ion Research“) [90] bei der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt sind, wie es der Name bereits vermuten lässt, Experimente mit Antiprotonen als eines der Forschungsschwerpunkte vorgesehen. Die dafür benötigte Intensität des primären Protonenstrahls kann vom existierenden Linearbeschleuniger UNILAC nicht bereitgestellt werden. Deshalb soll ein dedizierter Linearbeschleuniger mit direktem Einschuss in das vorhandene Synchrotron SIS 18 als Bestandteil der neuen Anlage aufgebaut werden [91]. Dieser soll einen Protonenstrahl mit einer Intensität von bis zu 70 mA auf 70 MeV beschleunigen. Weitere Parameter des aktuellen Designs wurden in Tabelle 7-6 aufgelistet.

**Tabelle 7-6 Hauptparameter des Driftröhren-Linearbeschleunigers für GSI-FAIR.**

Parameter	Wert
Resonanzfrequenz	325.224 MHz
Designteilchen	p
Design-Strahlstrom	70 mA
Tastverhältnis	0.144 ‰ (36 $\mu$ s $\times$ 4 Hz)
Energiebereich (Driftröhrenstruktur)	3 – 70 MeV
Driftröhrenstrukturen	6 gekoppelte, normalleitende CH-Kavitäten
Länge des Driftröhrenbeschleunigers	$\approx$ 24 m
<b>Ausgangsemittanzen</b>	
$\epsilon_{tr,norm,95\%}$	2.4 mm mrad
$\epsilon_{long,95\%}$	13.9 keV·ns

Die maximale Verlustrate von 1 W/m ist beim FAIR-Protoneninjektor irrelevant, da das Tastverhältnis mit ca. 0.02 ‰ sehr niedrig ist. Dennoch handelt es sich bei 70 mA um eine „Hochstrom“-Anwendung, so dass die präzise Simulation der Raumladungseffekte sowie quantitative Aussagen über die Maschinenfehler-Sensitivität des Designs hier nach wie vor eine wichtige Rolle spielen.

Die Beteiligung des IAP an der Konzeption des FAIR-Protonenlinacs reichte von der strahldynamischen Auslegung mit LORASR bis hin zur Entwicklung einer neuartigen, gekoppelten normalleitenden CH-Kavität als Basiseinheit (sechs gekoppelte Module decken den Energiebereich von 3-70 MeV ab). Dabei wurden elektromagnetische Strukturauslegungen mit CST Microwave Studio® sowie Messungen an einem Hochfrequenzmodell sowie an einem HF-leistungstauglichen Prototyp durchgeführt. Alle Aktivitäten fanden auch im Rahmen der HIPPI-Kollaboration statt (Arbeitspakete „normalleitende HF-Beschleunigerstrukturen“ sowie „Strahldynamik“, vergl. Kapitel 5.1). Die während der Laufzeit von HIPPI erzielten Fortschritte wurden mehrfach dokumentiert [8, 83, 92, 93] und werden unter anderem im Rahmen der Dissertation [85] umfassend dargestellt. Im vorliegenden Kapitel können lediglich Detailspekte dieser mehrjährigen und zurzeit andauernden Forschungsaktivität behandelt werden.

An dieser Stelle ist ein zeitlicher Abriss der Entwicklungsschritte innerhalb des Projektes sinnvoll, um die Besonderheiten des aktuell gültigen Designs hervorzuheben:

In einer frühen Planungsphase wurde eine aus 11 ungekoppelten CH-Kavitäten und 11 dazwischenliegenden Quadrupol-Triplett-Linsen bestehende Anordnung vorgeschlagen [52]. In Kapitel 4.3.2, Abbildung 41 wurde dieser Entwurf bereits gezeigt, im Zusammenhang mit der Effizienzanalyse des neuen LORASR-Raumladungssolvers. Die Resonanzfrequenz von 352 MHz wurde gewählt, um eventuell freigewordene CERN-LEP Klystren nutzen zu können. Diese haben jedoch eine maximal nutzbare Ausgangsleistung von 1.3 MW, so dass der Leistungsbedarf der CH-Resonatoren (und somit die maximale Anzahl der Gaps und die Resonatorlängen) diesem Limit angepasst werden mussten.

Es mussten also aus technischen und wirtschaftlichen Gründen Abstriche bei der strahldynamischen Auslegung des Beschleunigers gemacht werden. Hinzu kam, dass es zum damaligen Zeitpunkt noch kein endgültiges RFQ-Design mit aussagekräftigen Ausgangsteilchenverteilungen gab. Vielmehr hatte die Studie selbst zum Ziel, die optimale Übergangsenergie von RFQ zum Driftröhrenbeschleuniger zu definieren. Es wurden RFQ-Endenergien zwischen 2.5 und 4 MeV untersucht, bis schließlich 3 MeV als günstigster Übergangswert festgelegt wurde. Die aus dem RFQ-Design resultierenden Ausgangsemittanzen waren, insbesondere in der longitudinalen Ebene, deutlich größer als ursprünglich in den LORASR-Simulationen angenommen.

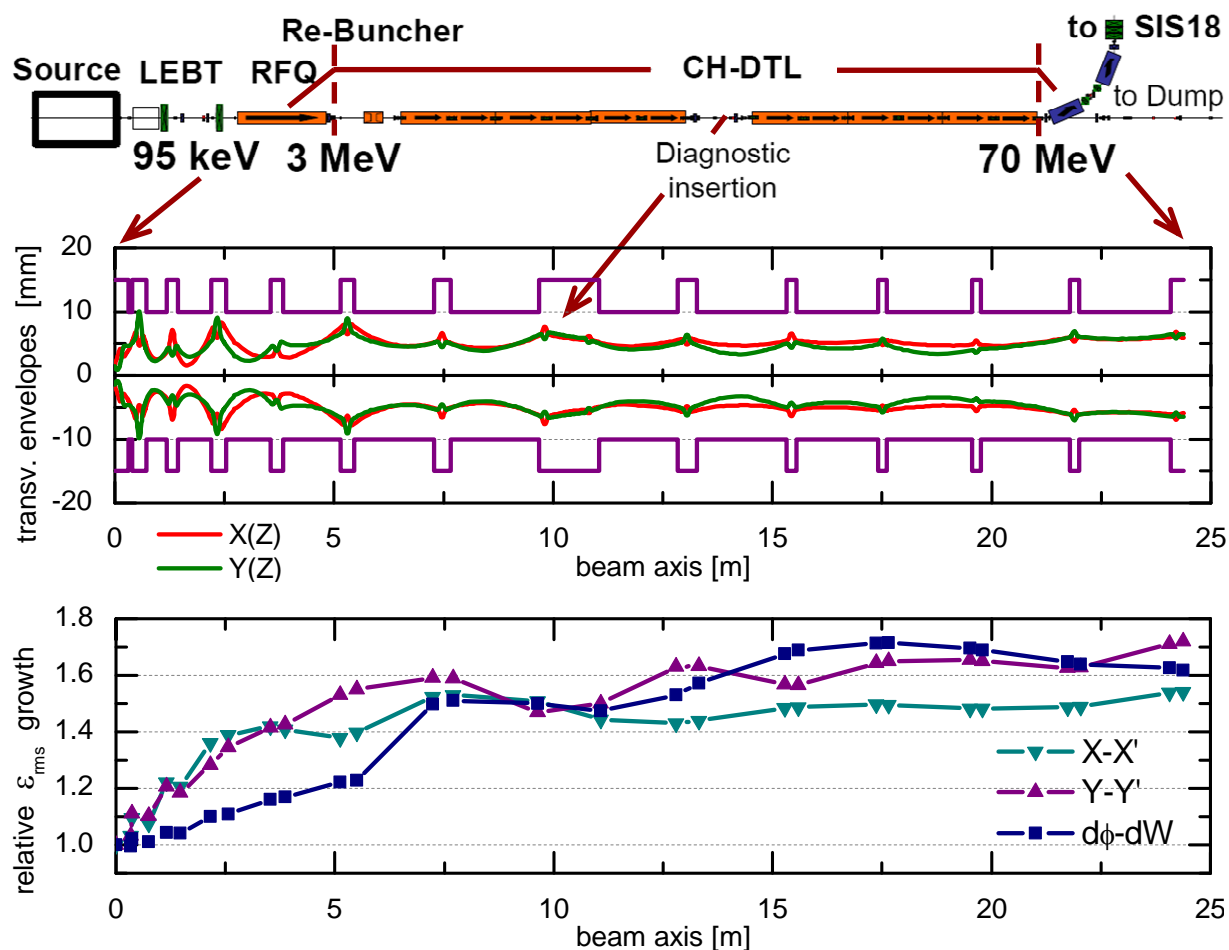
Aus der Summe der obengenannten Probleme bzw. Nachteile entstand der Bedarf nach einer größeren Umgestaltung des ursprünglichen Layouts. Bei dieser Gelegenheit wurde die Resonanzfrequenz neu definiert (nicht zuletzt, weil das Labor CERN zwischenzeitlich Eigenbedarf an den 352 MHz Klystren angemeldet hatte): Die neue Resonanzfrequenz des FAIR-Protonenlinacs liegt bei 325.244 MHz und ist zum einen genau die dreifache Frequenz des GSI-UNILAC, und zum anderen sind bei dieser Frequenz kommerzielle Klystren mit bis zu 2.5 MW verfügbarer Ausgangsleistung erhältlich. Diese sind weltweit an Teilchenbeschleunigern im Einsatz oder in Planung (z.B. an J-PARC [78] oder an ISIS [58]). Um die volle Leistungsfähigkeit ausnutzen zu können, kam die Idee einer gekoppelten CH-Kavität auf. Geplant sind nun 6 Klystren mit 2.2 MW Nutzleistung anstelle von 11 bis 12 Klystren mit 1.1 MW, was zu einer bedeutenden Senkung der Beschaffungs- und Betriebskosten führt. In der Zwischenzeit wurde die Realisierbarkeit dieser neuartigen Struktur anhand von numerischen Simulationen und Modellmessungen demonstriert [8, 85, 93]. Die Beauftragung und Herstellung eines Leistungsmoduls steht unmittelbar bevor.

Die Koppelzelle besteht aus einer großen zylindrischen Driftröhre im mittleren Tankbereich, welche in der  $E_{010}$  – Mode erregt wird und als Linsengehäuse für eine Quadrupol-Triplett-Linse verwendet werden kann. Dadurch ist die Bauweise sehr kompakt und die kurzen Driften zwischen den Tanks wirken sich insbesondere auf die longitudinale Strahldynamik positiv aus. Mehrere gekoppelte CH-Kavitäten können zu längeren Modulen zusammengeführt werden, so dass im Falle des FAIR-Protonenlinacs nur noch 2 lange Einheiten, bestehend aus je 6 Kavitäten von außen sichtbar sind (vergl. Abbildung 75).

Die ausführlich dargelegten technischen Vorteile dieses Konzeptes gehen natürlich mit deutlich verbesserten Strahldynamik-Ergebnissen einher. Wie man aus Abbildung 75 erkennt, ist die Ausleuchtung der Apertur unkritisch, insbesondere bei höheren Teilchengeschwindigkeiten. Hier werden 99% Enveloppen dargestellt, da bei 100% Enveloppen das bereits im RFQ ausgebildete „Halo“ einen falschen Eindruck erwecken würde. Eine sehr geringe Anzahl an Halo-Teilchen geht bereits in den ersten CH-Modulen verloren, so dass die Transmission für den Sollfall 99.98% beträgt. Das RMS-Emittanzwachstum ist mit Werten zwischen 55% und 70% auf einem akzeptablen Niveau. Das Hauptkriterium des strahldynamischen Designs war in diesem Fall jedoch die Einhaltung



der transversalen Akzeptanzen für den Einschuss in das SIS sowie die Begrenzung der longitudinalen Impulsunschärfe auf Werte unter  $10^{-3}$ . Beide Parameter werden erfüllt.



**Abbildung 75** Oben: Schematischer Aufbau des Protoneninjektors für GSI-FAIR. Mitte & unten: 99% Strahlenenveloppen und relatives RMS-Emittanzwachstum für den Sollfall, gerechnet mit  $\approx 2 \cdot 10^4$  Makroteilchen und einem Strahlstrom von 45 mA [83, 85]. Design: G. Clemente

Dem aktuell gültigen strahldynamischen Design des FAIR-Protonenlinacs ging eine umfangreiche Fehlertoleranzanalyse voraus, deren Ergebnisse an dieser Stelle nur grob umrissen werden können. Für weitere Details wird erneut auf die Referenzen [83] und [85] verwiesen.

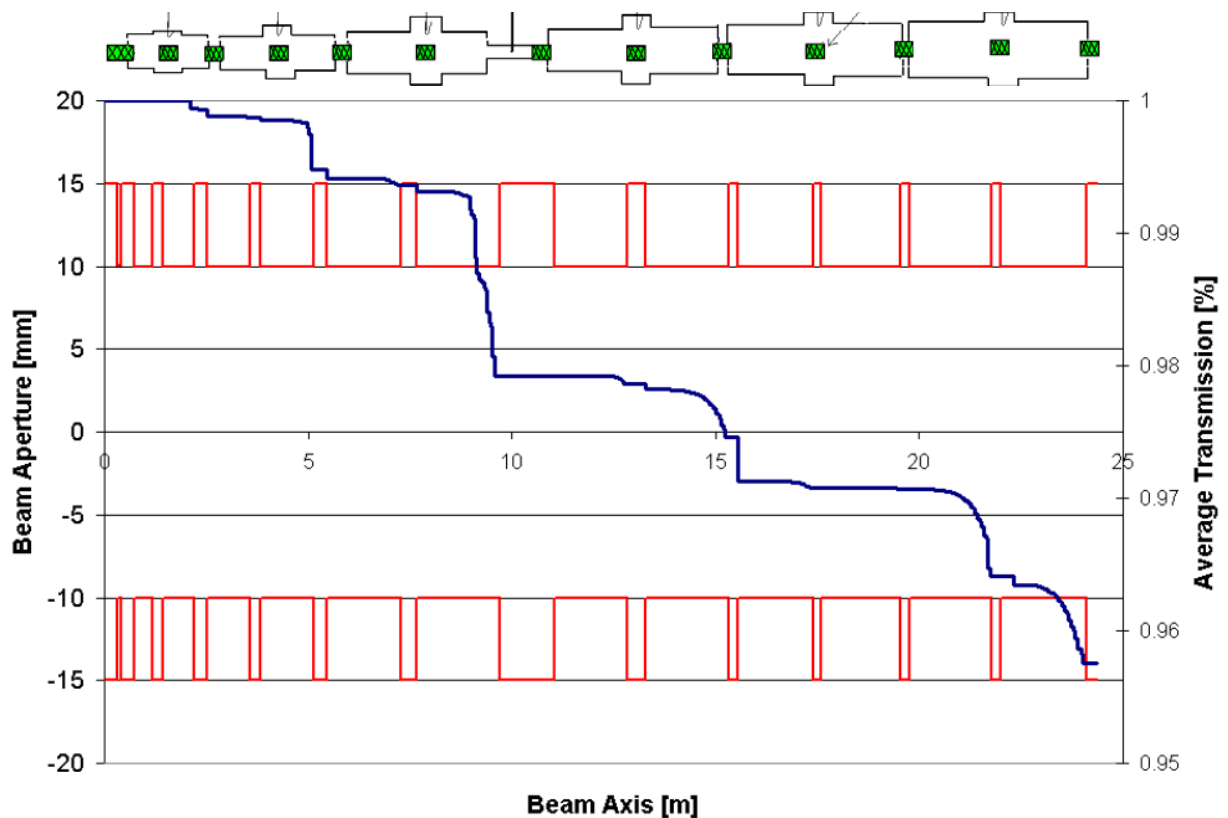
Als besonders kritisch erwies sich der Fehlerparameter Linsen-Translationen  $\Delta X$ ,  $\Delta Y$ . Bei einem Grenzwert von 0.1 mm beträgt die Transmission nur noch ca. 95.5 %, wie man aus Abbildung 76 erkennen kann. Für den hier nicht gezeigten Fall von maximalen Ablagen bis 0.2 mm fällt die Transmission rapide auf einen inakzeptablen Wert ab.

Die Verluste treten vorwiegend in der Umgebung der Quadrupol-Triplets auf und es gibt eine ausgewiesene Schwachstelle am Ausgang des dritten gekoppelten CH-Moduls bei  $W = 35$  MeV. An dieser Stelle ist eine längere Transportstrecke vorgesehen, welche unter anderem umfangreiche Strahldiagnoseeinrichtungen beherbergen wird. Dadurch gibt es aber, wie aus der schematischen Darstellung des Beschleunigers in Abbildung 76 ersichtlich, eine Unterbrechung der Periodizität der Anordnung: Zwischen der internen Linse der dritten gekoppelten CH-Kavität und der darauffolgenden Linse am Ende der Diagnosesektion ist ein

zu großer Abstand entstanden. Dieser Umstand erwies sich für den ungestörten Fall als unproblematisch und fiel erst als Ergebnis der Toleranzstudie als Schwachstelle auf. Infolgedessen wurde am Ausgang der dritten gekoppelten CH-Kavität eine weitere Linse integriert, wie in Abbildung 75 zu erkennen.

**Tabelle 7-7 Für die Toleranzstudie am FAIR-Protonenlinac verwendete Fehlerarten und Fehlergrößen.**

Fehlerart	Wertebereich
Linsen-Translationen $\Delta X, \Delta Y$ [mm]	$\leq 0.1$
Linsen-Rotationen $\Delta\phi_x, \Delta\phi_y, \Delta\phi_z$ [mrad]	$ \Delta\phi_x  \leq 1$ $ \Delta\phi_y  \leq 1$ $ \Delta\phi_z  \leq 5$
Schwankungen der Tank- und Einzelspalt-Spannungsamplituden $\Delta U_{i,j}$ [%]	$ \Delta U_{gap}  \leq 1.0$ $ \Delta U_{tank}  \leq 1.0$
Schwankungen der Tank-HF-Phase $\Delta\phi_i$ [°]	$\leq 1.0$



**Abbildung 76** Transmissionsraten als Ergebnis einer Fehlertoleranzanalyse mit den Setzwerten aus Tabelle 7-7. Es wurden 1000 Simulationsläufe mit je  $10^5$  Makroteilchen durchgeführt [83, 85].  
Design: G. Clemente.

## 8. Zusammenfassung

Viele der geplanten zukünftigen Beschleunigeranlagen oder Ausbaustufen existierender Einrichtungen erfordern steigende Strahlintensitäten. Diese bergen jedoch die Gefahr einer Beschädigung oder Aktivierung von Beschleunigerkomponenten. Insbesondere für „Multi-Megawatt-Anlagen“ im Dauerstrichbetrieb ergibt sich deshalb eine zulässige Strahlverlustobergrenze von  $10^{-6}/\text{m}$  oder niedriger. Dies macht Teilchendynamik-Simulationen mit  $10^6$  oder mehr Makroteilchen erforderlich. Dabei ist die Berechnung Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung („Raumladungskraft“) in der Regel der zeitaufwendigste Teil der Simulation. Raumladungseffekte zählen außerdem wegen der nichtlinearen Anteile in den Eigenfeldern des Strahls zu den häufigsten Ursachen einer Verschlechterung der Strahlqualität (resonante „Halo-Bildung“) mit möglichen Strahlverlusten als Konsequenz. Zusätzlich können in der Praxis sogenannte „Maschinenfehler“ (Fertigungs-, Justage- oder HF-Abstimmfehler) auftreten und die Strahlqualität im Vergleich zur Simulation noch weiter verschlechtern. Deshalb sollten zeitgemäße Strahldynamik-Simulationsprogramme über effiziente Raumladungssolver sowie über entsprechende Werkzeuge zum Aufprägen von Maschinenfehlern und zur Analyse der Ergebnisse verfügen.

Das am Institut für Angewandte Physik weiterentwickelte Simulationsprogramm LORASR ist das einzige dedizierte Instrument für Strahldynamikauslegungen basierend auf dem „Kombinierte Null Grad Struktur“ (KONUS) Konzept, welches unter Verwendung von H-Mode Kavitäten den Aufbau besonders kompakter und effizienter Linearbeschleuniger ermöglicht. Die Mehrzahl der am Institut für Angewandte Physik in den vergangenen Jahren konzipierten Linearbeschleuniger basieren auf KONUS, so dass dabei die strahldynamische Auslegung mit LORASR von großer Bedeutung ist. Zu Beginn der Arbeiten im Rahmen der vorliegenden Dissertation entsprach das Programm jedoch nicht allen obengenannten Anforderungen, so dass eine Reihe von Weiterentwicklungen notwendig war:

Zu allererst sei der neue „Particle in cell“ Raumladungssolver, basierend auf einer dreidimensionalen schnellen Fourier-Transformation (FFT = „Fast Fourier Transform“), genannt. Dieser löst die Poisson-Gleichung auf den Punkten eines kartesischen Gitters mit Dirichlet'sche Randbedingungen auf dessen Rand. Dabei gehört die FFT zu der Klasse der „spektralen Solver“, welche Differenzialgleichungen besonders effizient numerisch lösen. Im Falle der Poisson-Gleichung ist der Rechenaufwand von der Ordnung  $O(N \cdot \log_2 N)$ , wobei  $N$  der Anzahl der Gitterpunkte entspricht. Im Vergleich dazu ist der Rechenaufwand der „Particle-Particle“ (PP) Methode, bei welcher die Eigenfelder direkt aus der Superposition der Beiträge aller Makroteilchen berechnet werden, von der Ordnung  $O(N^2)$ . Dieser theoretische Unterschied wurde durch Benchmarking-Tests bestätigt: Um vergleichbare Rechenzeiten zu erzielen, konnten mit der neuen Routine  $10^6$  und mit der vormals implementierten LORASR PP-Routine lediglich  $10^4$  Simulationsteilchen verwendet werden.

Des Weiteren wurden Routinen zur Simulation von Maschinenfehlern sowie zur Analyse der Ergebnisse aus Fehlertoleranzstudien implementiert. Folgende Fehlerarten können gegenwärtig mit LORASR untersucht werden: Translationen und Rotationen der Fokussierelemente, Schwankungen der Spaltspannungsamplituden (sowohl einzelner Beschleunigungsspalte wie auch ganzer Beschleunigerkavitäten) sowie Schwankungen der HF-Phase ganzer Beschleunigerkavitäten.

Die Zahlenwerte der Fehler einzelner Elemente können entweder explizit angegeben werden (um so zum Beispiel die Auswirkungen tatsächlich gemessener Justagefehler der magnetischen Linsen oder gemessener Spaltspannungen zu untersuchen), oder per

Zufallsgenerator innerhalb vorgegebener Fehlerintervalle statistisch verteilt werden. Letzteres bedeutet, dass hinreichend viele Kombinationen simuliert werden müssen, um eine aussagekräftige Ergebnisinterpretation zu ermöglichen. Daher werden für statistische Fehlertoleranzstudien typischerweise 100 bis 1000 Simulationsläufe mit je  $10^5$  bis  $10^6$  Makroteilchen durchgeführt. Hierfür wurde in LORASR ein „Batch“-Modus implementiert, wobei bis zu 9999 Simulationsläufe mit unterschiedlichen Fehlerkombinationen und anschließender Protokollierung aller für die Fehleranalysefunktionen relevanten Ergebnisse durchgeführt werden. LORASR verfügt nun über folgende Analysewerkzeuge: Verlustprofile der einzelnen Läufe sowie gemittelte Verlustprofile und gemeinsame Strahlenveloppen berechnet aus dem Überlapp der Ergebnisse aller Läufe. Außerdem werden Wahrscheinlichkeitsverteilungen des maximalen Apertur-Füllfaktors und des zusätzlichen RMS-Emittanzwachstums ermittelt.

Die neue LORASR-Raumladungsroutine konnte im Rahmen der von der EU geförderten „High Intensity Pulsed Proton Injectors“ (HIPPI) - Kollaboration erfolgreich getestet und validiert werden. Dabei fanden zwischen 2004 und 2008 unter Beteiligung von Labors wie CERN, GSI oder RAL zahlreiche Benchmarking-Aktivitäten statt, wobei einige der in der Beschleunigergemeinschaft etablierten Teilchensimulationsprogramme verwendet wurden. Zu den wichtigsten Tests zählten der „statische“ Vergleich der Poisson-Raumladungssolver, bei welchem die von den beteiligten Programmen berechneten Eigenfelder eines Teststrahls untereinander verglichen wurden, sowie der Vergleich von Strahlsimulationsrechnungen entlang des GSI UNILAC-Alvarez-Abschnittes. Beim letztgenannten Vergleich wurden zunächst die Ergebnisse der Simulationsprogramme untereinander verglichen, unter Verwendung eines  $37.5 \text{ mA } ^{238}\text{U}^{28+}$  Teststrahls mit künstlich generierter Startverteilung (6D-Gaußverteilung am Einschuss in den ersten UNILAC-Alvarez-Beschleuniger bei  $W = 1.4 \text{ MeV/u}$ ). Anschließend wurden bei der GSI im Rahmen eines dedizierten Maschinenexperiments die Teilchenverteilungen eines  $7.1 \text{ mA, } ^{40}\text{Ar}^{10+}$  Strahls am Eingang sowie am Ausgang des Alvarez-Beschleunigerabschnittes gemessen und mit den Ergebnissen mehrerer Simulationsprogramme (darunter auch LORASR) verglichen. Alle mit LORASR im Rahmen der HIPPI-Kollaboration erzielten Ergebnisse konnten im Vergleich sehr gut bestehen.

Das Anwendungspotential der im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelten Simulationswerkzeuge konnte schließlich anhand mehrerer Beispiele verdeutlicht werden:

Am 217 MHz, 20 MV, 0.3 – 7 MeV/u IH-Linearbeschleuniger für die Heidelberger Ionenstrahl-Therapie (HIT) wurden Simulationsrechnungen anhand gemessener Quadrupol-Justagefehler und gemessener Spaltspannungsverteilungen durchgeführt. Diese konnten zeigen, dass alle Abweichungen von den Sollwerten für die Strahldynamik noch akzeptabel sind, so dass eine Freigabe der Kavität für die Inbetriebnahme erfolgen konnte.

Der IAP-Vorschlag eines 125 mA  $\text{D}^+$ , 5-40 MeV Driftröhrenbeschleunigers für IFMIF, bestehend aus normal- und supraleitenden CH-Kavitäten konnte wesentlich überarbeitet werden: Der Einsatz von supraleitenden Solenoidlinsen anstelle normalleitender Quadrupole ermöglichte eine kompakte Bauweise mit stark reduziertem Emittanzwachstum. Der neue Entwurf konnte durch Simulationen mit bis zu  $10^6$  Makroteilchen und einer detaillierten Fehlertoleranzanalyse abgesichert werden.

Beim aktuellen Designentwurf des 45 mA, 3-70 MeV Protoneninjektors für GSI-FAIR konnte durch die Fehlertoleranzanalyse eine Schwachstelle bei  $W = 35 \text{ MeV}$  aufgedeckt werden. Diese kam durch eine technisch bedingte Unterbrechung der Periodizität der Anordnung zustande und hatte sich in den Simulationen ohne Maschinenfehler als unproblematisch erwiesen. Infolge der Toleranzstudie wurde der Aufbau daher um eine weitere Linse erweitert.

## Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich recht herzlich bei allen Personen bedanken (auch bei den nicht namentlich genannten), welche mich am Institut für Angewandte Physik der Goethe-Universität Frankfurt während meiner Promotion unterstützend begleitet und so zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben:

- Meinem Doktorvater, Herrn Prof. Dr. Ulrich Ratzinger, gilt mein besonderer Dank, zum einen für seine umfassende fachliche Betreuung, welche sich durch Ideenreichtum und den geübten Blick für das Wesentliche auszeichnet und so die Arbeit in der vorliegenden Form maßgeblich geprägt hat. Darüber hinaus bin ich ihm für den unermüdlichen Zuspruch, während meiner langjährigen Mitarbeit im Institut das Ziel „Promotion“ nicht aus den Augen zu verlieren, zu großem Dank verpflichtet.
- Herrn Prof. Dr. em. Horst Klein möchte ich für zahlreiche Anregungen sowie seine stete Gesprächs- und Hilfsbereitschaft danken. Als einer der Verantwortlichen für den IAP-Beitrag zum IFMIF-Beschleuniger hat er die aus dem Projekt resultierenden Anforderungen an das Simulationsprogramm LORASR formuliert und somit die Themenschwerpunkte der vorliegenden Arbeit mit beeinflusst.
- Herrn Dr. Sergey Minaev von ITEP Moskau danke ich für den regen Austausch während seiner zahlreichen Gastaufenthalte am Institut für Angewandte Physik, wobei insbesondere seine Ideen und Vorschläge bei der Implementierung der Raumladungsroutine zu erwähnen sind.
- Den LORASR-Anwendern unter meinen aktuellen und ehemaligen Institutskollegen sei dafür gedankt, dass sie durch ihre konstruktiven Beiträge die Entwicklung der neuen Routinen mitgeprägt, diese immer wieder auf den Prüfstand gestellt und somit zur Minimierung der Fehler beigetragen haben. Mein Dank richtet sich, in zeitlicher Folge, an die Kollegen: Dr. Martin Droba, Dr. Andreas Sauer, Dr. Yuanrong Lu, Dr. Gianluigi Clemente, Dr. Chuan Zhang, Long Phi Chau.
- Schließlich danke ich den Mitgliedern der Arbeitsgruppe „LINAC“, allen voran dem Arbeitsgruppenleiter PD Dr. Holger Podlech für das regelmäßige Feedback und die hilfreichen, aus dem Blickwinkel der Strukturentwickler geführten Diskussionen.

Wichtige Stützen auf dem recht langen und nicht immer ebenen Weg bis zum Abschluss der vorliegenden Arbeit waren mir stets meine Frau Alicja und mein Sohn Christoph. Ich danke euch für eure Geduld und die uneingeschränkte Unterstützung, den Balanceakt zwischen Forschung, Beruf und Familie zu bewältigen.

## 9. Literaturverzeichnis

- [1] A. Franchi, W. Bayer, G. Franchetti, L. Groening, I. Hofmann, A. Orzhekhovskaya, S. Yaramyshev, X. Yin, A. Sauer, R. Tiede, G. Clemente, R. Duperrier, D. Uriot, G. Bellodi, F. Gerigk, A. Lombardi, T. Muetze  
„Linac Code Benchmarking in Preparation of the UNILAC Experiment“  
CARE-Note-2006-011-HIPPI.
- [2] U. Ratzinger, E. Nolte, R. Geier, N. Gaertner, H. Morinaga  
„The Upgraded Munich Linear Heavy Ion Postaccelerator“  
Nucl. Instr. and Meth. A263, p. 261-270 (1988).
- [3] U. Ratzinger  
„The IH-Structure and its Capability to Accelerate High Current Beams“  
Proc. of the 1991 IEEE Particle Accelerator Conf., San Francisco, p. 567-571.
- [4] U. Ratzinger  
„Commissioning of the New GSI High Current Linac and HIF Related rf Linac Aspects“  
Proc. of the 13th International Symposium on Heavy Ion Inertial Fusion, San Diego, 2000, Nucl. Instr. and Meth. A464, p. 636-645 (2001).
- [5] N. Angert, W. Bleuel, H. Gaiser, G. Hutter, E. Malwitz, R. Popescu, M. Rau, U. Ratzinger, Y. Bylinski, H. Haseroth, H. Kugler, R. Scrivens, E. Tanke, D. Warner  
„The IH-LINAC of the CERN Lead Injector“  
Proc. of the 1994 LINAC Conf., Tsukuba, p. 743-745.
- [6] Y.R. Lu, S. Minaev, U. Ratzinger, B. Schlitt, R. Tiede  
„The Compact 20 MV IH-DTL for the Heidelberg Therapy Facility“  
Proc. of the 2004 LINAC Conf., Lübeck, p. 57-59.
- [7] C. Kitegi, U. Ratzinger, S. Minaev  
„The IH Cavity for HITRAP“  
Proc. of the 2004 LINAC Conf., Lübeck, p. 54-56.
- [8] U. Ratzinger, G. Clemente, C. Commenda, H. Liebermann, H. Podlech, R. Tiede, W. Barth, L. Groening  
„A 70-MeV Proton Linac for the FAIR Facility Based on CH-Cavities“  
Proc. of the 2006 LINAC Conf., Knoxville, p. 526-530.
- [9] A. Sauer, H. Deitinghoff, H. Klein, H. Liebermann, H. Podlech, U. Ratzinger, R. Tiede  
„End-to-end Simulations of a Superconducting Deuteron CH-DTL for IFMIF“  
Proc. of the 2003 IEEE Particle Accelerator Conf., Portland, p. 2942-2944.
- [10] C. Zhang, M. Busch, H. Klein, H. Podlech, U. Ratzinger, R. Tiede  
„KONUS Dynamics and H-Mode DTL Structures for EUROTRANS and IFMIF“  
Proc. of the 2008 EPAC Conf., Genoa, p. 3239-3241.

- [11] A. Sauer  
„Untersuchungen zur Teilchendynamik in Hochstromlinearbeschleunigern für leichte Ionen“  
Dissertation, Inst. f. Angew. Phys., J. W. Goethe-Univ. Frankfurt am Main (2003).
- [12] U. Ratzinger, R. Tiede  
„Status of the HIF RF Linac Study Based on H-Mode Cavities“  
Nucl. Instr. and Meth. A 415, p. 229-235 (1998).
- [13] R. Wideröe  
„Über ein neues Prinzip zur Herstellung hoher Spannungen“  
Archiv für Elektrotechnik 21, p. 387-406 (1928).
- [14] L. W. Alvarez  
„The Design of a Proton Linear Accelerator“  
Phys. Rev. 70, p. 799-800 (1946).
- [15] H. Podlech, U. Ratzinger, H. Klein, C. Commenda, H. Liebermann, A. Sauer  
„Superconducting CH-Structure“  
Phys. Rev. ST Accel. Beams 10, 080101 (2007).
- [16] <http://www.cst.com/>
- [17] U. Ratzinger  
„Effiziente Hochfrequenz-Linearbeschleuniger für leichte und schwere Ionen“  
Habilitationsschrift, vorgelegt beim Fachbereich Physik der J.W.Goethe-Universität, Frankfurt am Main (1998).
- [18] E. M. McMillan  
„The Synchrotron – A Proposed High Energy Particle Accelerator“  
Phys. Rev. 68, p. 143-144 (1945).
- [19] P. M. Lapostolle, A. L. Septier, eds.  
„Linear Accelerators“  
North-Holland Publishing Company, Amsterdam (1970).
- [20] T. P. Wangler  
„RF Linear Accelerators“  
John Wiley & Sons, New York (1998).
- [21] H. Stöcker, Hrsg.  
„Taschenbuch der Physik“  
Verlag Harri Deutsch, 4. Auflage, Frankfurt am Main (2000).
- [22] E. M. McMillan  
„The Relation Between Phase Stability and First-Order Focusing in Linear Accelerators“  
Phys. Rev. 80, p. 493 (1950).

- [23] M. Reiser  
„Theory and Design of Charged Particle Beams“  
John Wiley & Sons, New York (1994).
- [24] E. D. Courant, M. S. Livingston, H. S. Snyder  
„The Strong-Focusing Synchrotron - A New High Energy Accelerator“  
Phys. Rev. 88, p. 1190-1196 (1952).
- [25] E. D. Courant, H. S. Snyder  
„Theory of the Alternating-Gradient Synchrotron“  
Annals of Physics, Vol. 3, Issue 1, p. 1-48 (1958).
- [26] H. Wiedemann  
„Particle Accelerator Physics: Basic Principles and Linear Beam Dynamics“  
Springer, Berlin Heidelberg New York, Second Edition (2003).
- [27] F. Hinterberger  
„Physik der Teilchenbeschleuniger und Ionenoptik“  
Springer, Berlin, 1. Auflage (1997).
- [28] F.J. Sacherer  
„RMS Envelope Equations with Space Charge“  
IEEE Trans. Nucl. Sci., NS-18, p. 1105-1107 (1971).
- [29] P. M. Lapostolle  
„Possible Emittance Increase through Filamentation due to Space Charge in Continuous Beams“  
IEEE Trans. Nucl. Sci., NS-18, p. 1101-1104 (1971).
- [30] U. Ratzinger, R. Tiede  
„Teilchendynamische Untersuchungen an einer ‚Kombinierten Null Grad Struktur‘ KONUS mit Quadrupoltriplett-Fokussierung“  
GSI-Arbeitsnotiz ALG10077SI, (1997).
- [31] <http://www.lahey.com/>
- [32] I.M. Kapchinsky  
„Theory of Resonance Linear Accelerators“  
Harwood Academic Publishers, Chur London Paris New York (1985).
- [33] M. Droba  
„Teilchendynamik in gefalteten Schwerionenlinearbeschleunigern“  
Dissertation, Techn. Univ. Darmstadt (2002).
- [34] U. Ratzinger, R. Tiede  
„A New Matcher Type Between RFQ and IH-DTL for the GSI High Current Heavy Ion Prestripper Linac“  
Proc. of the 1996 LINAC Conf., Geneva, p. 128-130.



- [35] K.R. Crandall  
„RFQ Radial Matching Sections and Fringe Fields“  
Proc. of the 1984 LINAC Conf., Darmstadt, p. 109-111.
- [36] M. Droba, K. Beilenhoff, H.L. Hartnagel, U. Ratzinger  
„180 Degree Bending Systems for High Current Heavy Ion Linacs“  
Proc. of the 2000 EPAC Conf., Vienna, p. 1483-1485.
- [37] L.P. Chau, O. Meusel, U. Ratzinger, A. Schempp, K. Volk, M. Heil  
„The Frankfurt Neutron Source at the Stern-Gerlach-Zentrum (FRANZ)“  
Proc. of the 2006 EPAC Conf., Edinburgh, p. 1690-1692.
- [38] C.S. Biddlecombe, N.S. Diserens, C.P. Riley, J. Simkin  
„PE2D User Guide“  
Rutherford Appelton Laboratory, Report RL-81-089 (1981).
- [39] R. Tiede, G. Clemente, H. Podlech, U. Ratzinger, A. Sauer, S. Minaev  
„LORASR Code Development“  
Proc. of the 2006 EPAC Conf., Edinburgh, p. 2194-2196.
- [40] R.W. Hockney, J.W. Eastwood  
„Computer Simulation Using Particles“  
Institute of Physics Publishing, Bristol (1992).
- [41] R. Sexl, H. K. Schmidt  
„Raum-Zeit-Relativität“  
Vieweg-Verlag, Braunschweig (1979).
- [42] H. Henke  
„Elektromagnetische Felder - Theorie und Anwendung“  
Springer-Verlag, Berlin (2007).
- [43] I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew, G. Musiol, H. Mühlig  
„Taschenbuch der Mathematik“  
Verlag Harri Deutsch, 3. Auflage, Frankfurt am Main (1997).
- [44] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling  
„Numerical Recipes in FORTRAN 77. The Art of Scientific Computing. Second Edition“  
Cambridge University Press (1992).
- [45] J.W. Cooley, J.W. Tukey  
„An Algorithm for the Machine Calculation of Complex Fourier Series“  
Math. Comput. 19, p. 297–301 (1965).
- [46] G. Turchetti, S. Rambaldi, A. Bazzani, M. Comunian, A. Pisent  
„3D Solutions of the Poisson–Vlasov Equations for a Charged Plasma and Particle-core Model in a Line of FODO Cells“  
Eur. Phys. J. C 30, p. 279–290 (2003).

- [47] S. Rambaldi, G. Turchetti, C. Benedetti, F. Mattioli, A. Franchi  
„Accuracy Analysis of a Spectral Poisson Solver “  
Nucl. Instr. and Meth. A 561, p. 223-229 (2006).
- [48] G. Turchetti, S. Rambaldi, A. Franchi  
„HALODYN, Documentation and User Manual“  
INFN, Laboratori Nazionali di Legnaro, Internal Report (2002).
- [49] J. D. Jackson  
„Klassische Elektrodynamik“  
Verlag de Gruyter, 3. Auflage, Berlin (2002).
- [50] R. A. James  
„The Solution of Poisson's Equation for Isolated Source Distributions“  
J. Comput. Phys. 25, p. 71–93 (1977).
- [51] Fujitsu Scientific Subroutine Library SSL II User's Guide,  
Fujitsu Ltd (1989).
- [52] R. Tiede, G. Clemente, H. Podlech, U. Ratzinger, W. Barth, L. Groening,  
Z. Li, S. Minaev  
„KONUS Beam Dynamics Design of a 70 mA, 70 MeV Proton CH-DTL  
for GSI-SIS12“  
Proc. of the 2004 LINAC Conf., Lübeck, p. 60-62.
- [53] <http://mgt-hippi.web.cern.ch/mgt-hippi/>
- [54] <http://care.lal.in2p3.fr/>
- [55] O. Napoly et al.  
„The CARE Accelerator R&D Programme in Europe“  
Proc. of the 2005 Particle Accelerator Conf., Knoxville, p. 749-751.
- [56] L. Groening, W. Barth, L. Dahl, W. Vinzenz, S. Yaramyshev,  
G. Clemente, U. Ratzinger, A. Schempp, R Tiede,  
„The 70 MeV Proton Linac for the Facility for Antiproton and Ion Research FAIR“  
Proc. of the 2006 LINAC Conf., Knoxville, p. 186-188.
- [57] F. Gerigk (Ed.), M. Vretenar (Ed.),  
„Linac 4 Technical Design Report“  
CERN-AB-2006-084 ABP/RF.
- [58] J. W. G. Thomason et al.  
„Megawatt Upgrades for the ISIS Facility“  
Proc. of the 2008 EPAC Conf., Genoa, p. 3554-3556.
- [59] M. A. Clarke-Gayther,  
„The Development of a Fast Beam Chopper for the Next Generation High Power  
Proton Drivers“  
Proc. of the 2008 EPAC Conf., Genoa, p. 3584-3586.

- [60] A. Franchi, R. Duperrier, G. Franchetti, F. Gerigk, L. Groening, I. Hofmann, A. Orzhekhovskaya, A. Sauer, D. Uriot, S. Yaramyshev,  
„Benchmarking Linac Codes for the HIPPI Project“  
33rd ICFA-HB2004 Advanced Beam Dynamics Workshop. AIP Conference Proceedings, Volume 773 (2005), p. 110-113.
- [61] L. Groening, W. Barth, W. Bayer, G. Clemente, L. Dahl, P. Forck, P. Gerhard, I. Hofmann, G. Riehl, S. Yaramyshev, D. Jeon, D. Uriot,  
„Benchmarking of Measurement and Simulation of Transverse RMS-emittance Growth“  
Phys. Rev. ST Accel. Beams 11, 094201 (2008).
- [62] A. Kolomiets, V. Pershin, I. Vorobyov, S. Yaramishev, J. Klabunde,  
„DYNAMION – The Code for Beam Dynamics Simulations in High Current Ion Linac“  
Proc. of the 1998 EPAC Conf., Stockholm, p. 1201-1203.
- [63] A. Franchi, M. Comunian, A. Pisent, G. Turchetti, S. Rambaldi, A. Bazzani,  
„HALODYN: A 3D Poisson-Vlasov Code to Simulate the Space Charge Effects in the High Intensity TRASCO Linac“  
Proc. of the 2002 LINAC Conf., Gyeongju, p. 653-655.
- [64] J. Qiang, R. D. Ryne, S. Habib, V. Decykz,  
„An Object-Oriented Parallel Particle-in-Cell Code for Beam Dynamics Simulation in Linear Accelerators“  
J. Comput. Phys. 163, p. 434–451 (2000).
- [65] H. Takeda,  
„Parmila“  
Los Alamos National Laboratory Report, LA-UR-98-4478 (2005).
- [66] R. Duperrier, N. Pichoff, D. Uriot,  
„CEA Saclay Codes Review for High Intensities Linacs Computations“  
Proc. of the 2002 International Conference on Computational Science ICCS, Amsterdam, p. 411-418.
- [67] N. Pichoff, J. M. Lagniel, S. Nath,  
„Simulation Results With an Alternate 3D Space Charge Routine, PICNIC“  
Proc. of the 1998 LINAC Conf., Chicago, p. 141-143.
- [68] A. Orzhekhovskaya, G. Franchetti,  
„A Space Charge Algorithm for Ellipsoidal Bunches with Arbitrary Beam Size and Particle Distribution“  
Proc. of the 2004 EPAC Conf., Lucerne, p. 1975-1977.
- [69] [http://laacg1.lanl.gov/laacg/services/download\\_sf.phtml](http://laacg1.lanl.gov/laacg/services/download_sf.phtml)

- [70] A. Franchi, W. Bayer, G. Franchetti, L. Groening, I. Hofmann, A. Orzhekhovskaya, S. Yaramyshev, X. Yin, A. Sauer, R. Tiede, G. Clemente, R. Duperrier, D. Uriot, G. Bellodi, F. Gerigk, A. Lombardi, T. Mütze,  
„Linac Code Benchmarking for the UNILAC Experiment“  
Proc. of the 2006 LINAC Conf., Knoxville, p. 460-462.
- [71] [http://www-linux.gsi.de/~franchi/HIPPI/web\\_code\\_benchmarking.html](http://www-linux.gsi.de/~franchi/HIPPI/web_code_benchmarking.html)
- [72] W. Bayer, W. Barth, L. Dahl, P. Forck, P. Gerhard, L. Groening, I. Hofmann, S. Yaramyshev, D. Jeon,  
„High Intensity Heavy Ion Beam Emittance Measurements at the GSI UNILAC“  
Proc. of the 2007 Particle Accelerator Conf., Albuquerque, p. 1413-1415.
- [73] N. V. Mokhov, W. Chou, eds.  
„Beam Halo and Scraping“  
Proc. of the 7<sup>th</sup> ICFA Mini-Workshop on Beam Halo and Scraping, Lake Como, Wisconsin, September 13-15, 1999, Fermilab-Conf-00/185 (2000).
- [74] F. Gerigk (Ed.),  
„Conceptual Design of the SPL II“  
CERN-2006-006.
- [75] M. Baylac, J.M. de Conto, E. Froidefond, E. Sargsyan,  
„Error Study of CERN Linac 4“  
Proc. of the 2006 EPAC Conf., Edinburgh, p. 294-296.
- [76] <http://neutrons.ornl.gov/>
- [77] K.R. Crandall,  
„Error Studies for SNS Linac“  
Los Alamos National Laboratory Report, LA-UR-98-3372 (1998).
- [78] <http://j-parc.jp/index-e.html>
- [79] M. Ikegami, T. Ohkawa, Y. Kondo, A. Ueno,  
„A Simulation Study on Error Effects in J-PARC Linac“  
Proc. of the 2004 LINAC Conf., Lübeck, p. 345-347.
- [80] D.V. Gorelov, P.N. Ostroumov,  
„Application of LANA Code for Design of Ion Linac“  
Proc. of the 1996 EPAC Conf., Sitges, p. 1271-1273.
- [81] D.V. Gorelov, P.N. Ostroumov,  
„Simulation of Beam Dynamics Including Space Charge in Proton Linac With Errors“  
Proc. of the 1998 LINAC Conf., Chicago, p. 654-656.
- [82] X. Wu, D. Gorelov, T. Grimm, W. Hartung, F. Marti, R.C. York,  
„The Beam Dynamics Studies of Combined Misalignments and RF Errors for RIA“  
Proc. of the 2003 Particle Accelerator Conf., Portland, p. 2972-2974.

- [83] G. Clemente, L. Groening, U. Ratzinger, R. Tiede, S. Minaev  
„Beam Dynamics Layout and Loss Studies for the FAIR P-Injector“  
Proc. of the 2008 EPAC Conf., Genoa, p. 2701-2703.
- [84] Y. Lu  
„Development of an IH-DTL Injector for the Heidelberg Cancer Therapy Project“  
Dissertation, Inst. f. Angew. Phys., J. W. Goethe-Univ. Frankfurt am Main (2005).
- [85] G. Clemente  
„The Room Temperature CH-DTL and its Application for the FAIR Proton Injector“  
Dissertation, Inst. f. Angew. Phys., J. W. Goethe-Univ. Frankfurt am Main (2007).
- [86] H. Eickhoff, Th. Haberer, B. Schlitt, U. Weinrich,  
„HICAT – The German Hospital-based Light Ion Cancer Therapy Project“  
Proc. of the 2004 EPAC Conf., Lucerne, p. 290-294.
- [87] G. Clemente, S. Minaev, U. Ratzinger, R. Tiede, H. Vormann,  
„Final Tuning and Tolerances of the 217 MHz, 20MV IH - Linac for HICAT“  
IAP Internal Note No. IAP-ACC-071206, December 2006.
- [88] H. Nakamura et al. (Eds.),  
„IFMIF-KEP International Fusion Materials Irradiation Facility Key Element  
Technology Phase Report“  
JAERI-Tech 2003-005.
- [89] A. Sauer, H. Klein, H. Podlech, U. Ratzinger, R. Tiede,  
„Assessment of Beam Losses Along the Accelerator Line for Dose Calculations“  
Final report on the EFDA task TW5-TTMI-001, Deliverable 3, 2007.
- [90] <http://www.gsi.de/fair/>
- [91] L. Groening (Ed.),  
„ Technical Design Report : FAIR Proton-Linac“  
FAIR Technical Meeting on In Kind Contributions, March 2008.  
Available at: <http://www-win.gsi.de/FAIR-EOI/information.htm>.
- [92] G. Clemente, H. Podlech, R. Tiede, U. Ratzinger, L. Groening, S. Minaev  
„Beam Dynamics Investigation of the First Tank of a 70 mA CH-DTL Proton  
Injector“  
CARE-Note-2005-016-HIPPI.
- [93] G. Clemente, H. Podlech, R. Tiede, U. Ratzinger, L. Groening, S. Minaev  
„Development, Construction and Testing of a Room Temperature CH-DTL“  
CARE-Note-2007-001-HIPPI.

# Lebenslauf

Name: Rudolf Tiede  
Geburtsdatum: 13.01.1965  
Geburtsort: Bukarest, Rumänien  
Staatsangehörigkeit: Deutsch  
Familienstand: verheiratet,  
1 Kind (geb. am 16.03.1996)



## Schulausbildung:

1971 - 1979 Schulbesuch in Bukarest / Rumänien. Im Dezember 1979  
Übersiedlung in die Bundesrepublik Deutschland  
1980 - 1982 Heimschule St. Landolin Ettenheim; Realschulabschluss  
1982 - 1985 Fichte-Gymnasium Karlsruhe; Abitur

## Wehrdienst:

Oktober 1985 – Dezember 1986 Grundwehrdienst in Nürnberg und Koblenz

## Studium:

SS 1987 - SS 1989 Studium der Physik an der Universität Heidelberg  
Diplom-Vorprüfung am 1. 6. 1989  
WS 1989/1990 - WS 1993/1994 Studium der Physik an der Universität Frankfurt  
Diplom-Hauptprüfung am 4. 11. 1993  
Thema der Diplomarbeit: „Abhängigkeit der Spaltspannungsverteilung in einer IH-Struktur von der Geometrie der Beschleunigertankenden“

## Beruflicher Werdegang:

1.03.1994 - 31.08.1998 Wissenschaftlicher Mitarbeiter bei der Gesellschaft für  
Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt  
1.09.1998 - 31.08.2000 Projektmanager Simulation bei der SimPlan GmbH  
in Mühlheim a.M.  
Seit 1.09.2000 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für  
Angewandte Physik der Goethe-Universität Frankfurt

Im Herbst 2004 Beginn der Arbeiten zur vorliegenden Dissertation.

# Akademische Lehrer

H.J. Pirner, U. Schmidt-Rohr, D. Schwalm (Universität Heidelberg),  
T. Elze, H. Haug, P. Junior, H. Klein, B. Lüthi, E. Mohler, U. Ratzinger  
(Universität Frankfurt)